Lösungsvorschlag zum Übungsblatt Nr.12

Aufgabe 35

a.)

Wir benötigen die α^1- und die β-Matrix:

$$\alpha^1 = \begin{pmatrix} \mathbf{0}_2 & \sigma^1 \\ \sigma^1 & \mathbf{0}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_2 & \mathbf{0}_2 \\ \mathbf{0}_2 & \mathbb{1}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{1}$$

Wir verwenden nun die folgenden Abkürzungen:

$$\psi_{\mathrm{in}}(t,x) = \widetilde{\psi}_{\mathrm{in}}(t,x) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ cp/(E+mc^2) \end{pmatrix}, \quad \widetilde{\psi}_{\mathrm{in}}(t,x) = \sqrt{\frac{E+mc^2}{2mc^2}} \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(px - Et)\right), \tag{2a}$$

$$\psi_r(t,x) = \widetilde{\psi}_r(t,x) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -cp/(E+mc^2) \end{pmatrix}, \quad \widetilde{\psi}_r(t,x) = R\sqrt{\frac{E+mc^2}{2mc^2}} \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(-px - Et)\right), \tag{2b}$$

$$\psi_t(t,x) = \widetilde{\psi}_t(t,x) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ cq/(E-V_0+mc^2) \end{pmatrix}, \quad \widetilde{\psi}_t(t,x) = T\sqrt{\frac{E+mc^2}{2mc^2}} \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(px - Et)\right). \tag{2c}$$

Schauen wir uns zuerst die Dirac-Gleichung im Bereich $x \geq 0$, also für $\psi_t(t,x)$ an. Die linke Seite der Dirac-Gleichung lautet:

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi_t(t,x)}{\partial t} = \mathrm{i}\hbar\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E\right)\widetilde{\psi}_t(t,x) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ cq/(E-V_0+mc^2) \end{pmatrix} = E\widetilde{\psi}_t(t,x) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ cq/(E-V_0+mc^2) \end{pmatrix}. \tag{3}$$

Und nun zur rechten Seite:

$$
\begin{aligned}
H_D\psi(t,x) &= \left(-\mathrm{i}\hbar c\alpha^1\frac{\partial}{\partial x} + V_0\mathbb{1}_4 + mc^2\beta\right)\psi_t(t,x) = \\
&= \left(cq\alpha^1 + V_0\mathbb{1}_4 + mc^2\beta\right)\widetilde{\psi}_t(t,x)\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ cq/(E-V_0+mc^2)\end{pmatrix} = \\
&= \widetilde{\psi}_t(t,x)\left\{cq\begin{pmatrix} cq/(E+V_0+mc^2) \\ 0 \\ 0 \\ 1\end{pmatrix} + V_0\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ cq/(E-V_0+mc^2)\end{pmatrix}\right. \\
&\qquad\left. + mc^2\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -cq/(E-V_0+mc^2)\end{pmatrix}\right\} = \\
&= \widetilde{\psi}_t(t,x)\begin{pmatrix} c^2q^2/(E+V_0+mc^2) + V_0 + mc^2 \\ 0 \\ 0 \\ cq + (V_0-mc^2)cq/(E-V_0+mc^2)\end{pmatrix} = \\
&= \widetilde{\psi}_t(t,x)\begin{pmatrix} (c^2q^2 + (V_0+mc^2)E - V_0^2 - m^2c^4)/(E-V_0+mc^2) \\ 0 \\ 0 \\ Ecq/(E-V_0+mc^2)\end{pmatrix} = \\
&= \widetilde{\psi}_t(t,x)\begin{pmatrix} E(E-V_0+mc^2)/(E-V_0+mc^2) \\ 0 \\ 0 \\ Ecq/(E-V_0+mc^2)\end{pmatrix} = \\
&= \boxed{E\widetilde{\psi}_t(t,x)\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ cq/(E-V-0+mc^2)\end{pmatrix}}\ .
\end{aligned}
\tag{4}
$$

Kommen wir nun zum Bereich $x < 0$ (mit $V_0 = 0$) und schauen uns die linke Seite der Dirac-Gleichung an:

$$
\begin{aligned}
\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi(t,x)}{\partial t} &= \mathrm{i}\hbar\left\{\frac{\partial\psi_{\mathrm{in}}}{\partial t} + \frac{\partial\psi_r}{\partial t}\right\} = \\
&= E\widetilde{\psi}_{\mathrm{in}}(t,x)\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ cp/(E+mc^2)\end{pmatrix} + E\widetilde{\psi}_r(t,x)\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -cp/(E+mc^2)\end{pmatrix}\ .
\end{aligned}
\tag{5}
$$

Für die rechte Seite gilt:

$$
\begin{aligned}
H_D\psi_{\mathrm{in}}(t,x) &= \left(-\mathrm{i}\hbar c\alpha^1\frac{\partial}{\partial x} + mc^2\beta\right)\psi_{\mathrm{in}}(t,x) = (cp\alpha^1 + mc^2\beta)\widetilde{\psi}_{\mathrm{in}}(t,x)\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ cp/(E+mc^2)\end{pmatrix} = \\
&= \widetilde{\psi}_{\mathrm{in}}(t,x)\left\{cp\begin{pmatrix} cp/(E+mc^2) \\ 0 \\ 0 \\ 1\end{pmatrix} + mc^2\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -cp/(E+mc^2)\end{pmatrix}\right\} = \\
&= \widetilde{\psi}_{\mathrm{in}}(t,x)\begin{pmatrix} E \\ 0 \\ 0 \\ cp\left\{1 - mc^2/(E+mc^2)\right\}\end{pmatrix} = \boxed{E\widetilde{\psi}_{\mathrm{in}}(t,x)\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ cp/(E+mc^2)\end{pmatrix}}\ .
\end{aligned}
\tag{6}
$$

$$H_D\psi_r(t,x) = \left(-\mathrm{i}\hbar c\alpha^1\frac{\partial}{\partial x} + mc^2\beta\right)\psi_r(t,x) = (-cp\alpha^1 + mc^2\beta)\widetilde{\psi}_r(t,x)\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -cp/(E+mc^2) \end{pmatrix} =$$

$$= \widetilde{\psi}_r(t,x)\left\{-cp\begin{pmatrix} -cp/(E+mc^2) \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} + mc^2\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ cp/(E+mc^2) \end{pmatrix}\right\} =$$

$$= \widetilde{\psi}_r(t,x)\begin{pmatrix} E \\ 0 \\ 0 \\ cp\left\{-1 + mc^2/(E+mc^2)\right\} \end{pmatrix} = \boxed{\widetilde{\psi}_r(t,x)E\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -cp/(E+mc^2) \end{pmatrix}.} \tag{7}$$

Damit erfüllt $\psi_t(t,x)$ die Diracgleichung für $x \geq 0$ und $\psi_{\text{in}}(t,x) + \psi_r(t,x)$ die Diracgleichung für $x < 0$. Reflexions- und Transmissionskoeffizient berechnen wir aus der Stetigkeitsbedingung bei $x = 0$:

$$\boxed{\psi_t(t,0) = \psi_{\text{in}}(t,0) + \psi_r(t,0)\,.} \tag{8}$$

Es gilt also

$$T\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ cq/(E-V_0+mc^2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ cp/(E+mc^2) \end{pmatrix} + R\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -cp/(E+mc^2) \end{pmatrix}, \tag{9}$$

und wir erhalten folgendes Gleichungssystem:

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -cq/(V_0-E-mc^2) & cp/(E+mc^2) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} T \\ R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ cp/(E+mc^2) \end{pmatrix}. \tag{10}$$

Wir führen die Definitionen

$$\alpha = E + mc^2\,, \quad \beta = E - mc^2\,, \quad \gamma = (V_0 - E) + mc^2\,, \quad \delta = (V_0 - E) - mc^2\,, \tag{11}$$

ein, womit sich das Gleichungssystem auf die folgende Form bringen lässt:

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -\sqrt{\gamma/\delta} & \sqrt{\beta/\alpha} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} T \\ R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{\beta/\alpha} \end{pmatrix}. \tag{12}$$

Die Lösung berechnet man am schnellsten mit der inversen Matrix:

$$\begin{pmatrix} T \\ R \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{\beta/\alpha} - \sqrt{\gamma/\delta}}\begin{pmatrix} \sqrt{\beta/\alpha} & 1 \\ \sqrt{\gamma/\delta} & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{\beta/\alpha} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2\sqrt{\beta/\alpha}/(\sqrt{\beta/\alpha} - \sqrt{\gamma/\delta}) \\ (\sqrt{\beta/\alpha} - \sqrt{\gamma/\delta})/(\sqrt{\beta/\alpha} - \sqrt{\gamma/\delta}) \end{pmatrix}. \tag{13}$$

Führen wir die Bezeichnung

$$\varrho \equiv \sqrt{\frac{\gamma \cdot \alpha}{\delta \cdot \beta}} = \sqrt{\frac{(V_0 - E + mc^2)(E + mc^2)}{(V_0 - E - mc^2)(E - mc^2)}}\,, \tag{14}$$

ein, so folgt schlussendlich:

$$\boxed{T = \frac{2}{1-\varrho}\,, \quad R = \frac{1+\varrho}{1-\varrho}\,.} \tag{15}$$

Durch direktes Einsetzen ergibt sich der Spezialfall für $V_0 = 2E$:

$$\boxed{\varrho = \frac{E+mc^2}{E-mc^2}\,, \quad R = -\frac{E}{mc^2}\,, \quad T = -\frac{E-mc^2}{mc^2}\,.} \tag{16}$$

b.)

Kommen wir nun zu den Stromdichten:

$$j_{\text{in}} = \psi_{\text{in}}^{\dagger} c\alpha^1 \psi_{\text{in}} = \frac{E+mc^2}{2mc}\left(1,0,0,\frac{cp}{E+mc^2}\right)\cdot\begin{pmatrix}0&0&0&1\\0&0&1&0\\0&1&0&0\\1&0&0&0\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}1\\0\\0\\cp/(E+mc^2)\end{pmatrix}=$$

$$= \frac{E+mc^2}{2mc}\left(1,0,0,\frac{cp}{E+mc^2}\right)\cdot\begin{pmatrix}cp/(E+mc^2)\\0\\0\\1\end{pmatrix} = \frac{2cp}{E+mc^2}\cdot\frac{E+mc^2}{2mc} = \boxed{\frac{p}{m}\,,} \tag{17}$$

$$j_r = \psi_r^{\dagger} c\alpha^1 \psi_r = R^2\frac{E+mc^2}{2mc}\left(1,0,0,-\frac{cp}{E+mc^2}\right)\cdot\begin{pmatrix}0&0&0&1\\0&0&1&0\\0&1&0&0\\1&0&0&0\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}1\\0\\0\\-cp/(E+mc^2)\end{pmatrix}=$$

$$= R^2\frac{E+mc^2}{2mc}\left(1,0,0,-\frac{cp}{E+mc^2}\right)\cdot\begin{pmatrix}-cp/(E+mc^2)\\0\\0\\1\end{pmatrix} = -R^2\frac{2cp}{E+mc^2}\cdot\frac{E+mc^2}{2mc} = \boxed{-R^2\frac{p}{m}\,.} \tag{18}$$

Analog zu den vorherigen beiden Stromdichten gilt dann:

$$j_t = \psi_t^{\dagger} c\alpha^1 \psi_t = T^2\frac{E+mc^2}{2mc}\left(1,0,0,\frac{cq}{E-V_0+mc^2}\right)\cdot\begin{pmatrix}0&0&0&1\\0&0&1&0\\0&1&0&0\\1&0&0&0\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}1\\0\\0\\cq/(E-V_0+mc^2)\end{pmatrix}=$$

$$= T^2\frac{E+mc^2}{2mc}\cdot\frac{2cq}{E-V-0+mc^2} = -T^2\frac{E+mc^2}{V_0-E-mc^2}\frac{q}{m}\,. \tag{19}$$

Wir können die Stromdichten noch mittels der zuvor definieren Größen ausdrücken:

$$j_{\text{in}} = \frac{\sqrt{\alpha\beta}}{mc}\,,\quad j_r = -R^2\frac{\sqrt{\alpha\beta}}{mc}\,, \tag{20a}$$

$$j_t = -T^2\frac{\sqrt{\gamma\delta}}{mc}\frac{\alpha}{\delta} = -\frac{T^2}{mc}\alpha\sqrt{\frac{\gamma}{\delta}}\,. \tag{20b}$$

Die zu berechnenden Verhältnisse lauten nun

$$\frac{j_r}{j_{\text{in}}} = -R^2 = \boxed{-\left(\frac{1+\varrho}{1-\varrho}\right)^2\,,} \tag{21a}$$

und

$$\frac{j_t}{j_{\text{in}}} = -T^2\sqrt{\frac{\alpha\cdot\gamma}{\beta\cdot\delta}} = \boxed{-\frac{4\varrho}{(1-\varrho)^2}\,.} \tag{21b}$$

Analog zu vorher erhält man den Spezialfall $V_0 = E$ durch direktes Einsetzen:

$$\boxed{\frac{j_r}{j_{\text{in}}} = -\left(\frac{E}{mc^2}\right)^2\,,\quad \frac{j_t}{j_{\text{in}}} = -\frac{E^2-m^2c^4}{m^2c^4}\,.} \tag{22}$$

Der an der Barriere reflektierte Teilchenstrom ist wegen $E > mc^2$ größer als der einlaufende Strom. Weiterhin besitzt der transmittierte Strom (welcher durch das Potential läuft) ein negatives Vorzeichen; es handelt sich also um einen nach links laufenden Strom, den es eigentlich nicht gegen dürfte, weil wir angenommen haben, dass kein Teilchen von rechts einläuft. Dieses mekrwürdige Verhalten von relativistischen Wellenfunktionen (Lösungen der Dirac-Gleichung) an einer Potentialstufe bezeichnet man als **Kleinsches Paradoxon**. Das Paradoxon wird durch die Tatsache aufgelöst, dass an der Potentialstufe Teilchen-Antiteilchen-Paare erzeugt werden. Die Stromdichte von Antiteilchen läuft entgegen der Stromrichtung von gewöhnlichen Teilchen. Die reflektierte Stromdichte ist also gegenüber der einlaufenden erhöht, weil ein zusätzliches Teilchen entstanden ist, das nach links läuft. Bei der transmittierten Stromdichte handelt es sich um ein nach rechts laufendes Antiteilchen. Bei Anwesenheit eines Potentials werden aus dem Vakuum somit Teilchen-Antiteilchen-Paare gebildet.

Aufgabe 36

Wir gehen von der kontinuierlichen Formulierung der Berry-Phase aus, also

$$\gamma_c(\mathcal{C}) = \oint_{\mathcal{C}} \mathrm{Im}\langle \psi_n(\boldsymbol{\lambda}) | \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{\lambda}} \psi_n(\boldsymbol{\lambda})\rangle \, \mathrm{d}\boldsymbol{\lambda} \,. \tag{23}$$

Wir ersetzen die Integration durch eine Summe und erhalten

$$\gamma_n(\mathcal{C}) = \sum_{i=0}^{N} \mathrm{Im}\langle \psi_n(\boldsymbol{\lambda}_i) | \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{\lambda}_i} \psi_n(\boldsymbol{\lambda}_i)\rangle \cdot \Delta\boldsymbol{\lambda} \,. \tag{24}$$

Wir verwenden nun, dass für kleine Argumente

$$\ln(1+x) = x + \mathcal{O}(x^2)\,, \quad \exp(x) = 1 + x + \mathcal{O}(x^2)\,, \tag{25}$$

gilt. Dies führt dann auf:

$$\begin{aligned}\gamma_n(\mathcal{C}) &\approx \sum_{i=0}^{N} \mathrm{Im}\left\{\ln\left[1 + \langle \psi_n(\boldsymbol{\lambda}_i) | \Delta\boldsymbol{\lambda}\cdot\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{\lambda}_i}\psi_n(\boldsymbol{\lambda}_i)\rangle\right]\right\} = \sum_{i=0}^{N} \mathrm{Im}\left\{\ln\left[\langle \psi_n(\boldsymbol{\lambda}_i) | (1 + \Delta\boldsymbol{\lambda}\cdot\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{\lambda}_i})\psi_n(\boldsymbol{\lambda}_i)\rangle\right]\right\} \approx \\ &\approx \sum_{i=0}^{N} \mathrm{Im}\left\{\ln\left[\langle \psi_n(\boldsymbol{\lambda}_i) | \exp(\Delta\boldsymbol{\lambda}\cdot\boldsymbol{\nabla}_{\lambda_i})\psi_n(\boldsymbol{\lambda}_i)\rangle\right]\right\} = \sum_{i=0}^{N} \mathrm{Im}\left\{\ln\left[\langle \psi_n(\boldsymbol{\lambda}_i) | \psi_n(\boldsymbol{\lambda}_i + \Delta\boldsymbol{\lambda})\rangle\right]\right\}\end{aligned} \tag{26}$$

Hierbei haben wir benutzt, dass

$$T_{\mathbf{a}} = \exp(\mathbf{a}\cdot\boldsymbol{\nabla}_x)\,, \tag{27}$$

der Translationsoperator ist, welcher das Argument einer Funktion $f(\mathbf{x})$ um den Vektor $\mathbf{a}$ verschiebt. Dies lässt sich mittels der Taylorreihe zeigen:

$$f(\mathbf{x}+\mathbf{a}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}(\mathbf{a}\cdot\boldsymbol{\nabla})^n f(\mathbf{x}) = \exp(\mathbf{a}\cdot\boldsymbol{\nabla}_x) f(\mathbf{x}) = T_{\mathbf{a}} f(\mathbf{x})\,. \tag{28}$$

Mit $\mathrm{Im}[\ln(x)] = \arg(x)$ und $\psi_n(\boldsymbol{\lambda}_i + \Delta\boldsymbol{\lambda}) = \psi_n(\boldsymbol{\lambda}_{i+1})$ kommt man dann schließlich auf die angegebene Formel. Nach dieser Formel lässt sich die Berry-Phase für eine diskretisierte Kurve berechnen als die Summe der Phasendifferenzen $[\Delta\phi_n]_{i,i+1}$ (was ja gerade die Argumentenfunktion besagt) zwischen benachbarten Kurvenpunkten $\boldsymbol{\lambda}_i$ und $\boldsymbol{\lambda}_{i+1}$:

$$\gamma_n(\mathcal{C}) = \sum_{i=0}^{N} [\Delta\phi_n]_{i,i+1}\,, \quad [\Delta\phi_n]_{i,i+1} = \arg(\langle \psi_n(\boldsymbol{\lambda}_i) | \psi_n(\boldsymbol{\lambda}_{i+1})\rangle)\,. \tag{29}$$

Für eine allgemeine komplexe Zahl gilt:

$$\mathrm{Im}\left\{\ln\left(r\exp(\mathrm{i}\varphi)\right)\right\} = \mathrm{Im}\left\{\ln(r) + \mathrm{i}\varphi\right\} = \varphi = \arg(z)\,, \tag{30}$$

und damit folgt:

$$\sum_{i=0}^{N} [\Delta\phi_n]_{i,i+1} = \mathrm{Im}\left\{\sum_{i=0}^{N} \ln[\langle \psi_n(\boldsymbol{\lambda}_i) | \psi_n(\boldsymbol{\lambda}_{i+1})\rangle]\right\} = \mathrm{Im}\left\{\ln\left[\prod_{i=0}^{N} \langle \psi_n(\boldsymbol{\lambda}_i) | \psi_n(\boldsymbol{\lambda}_{i+1})\rangle\right]\right\}\,. \tag{31}$$

Bei einer geschlossenen Kurve stimmt der Anfangs- mit dem Endpunkt überein ($\boldsymbol{\lambda}_{N+1} = \boldsymbol{\lambda}_0$) und wir erhalten:

$$\gamma_n(\mathcal{C}) = \mathrm{Im}\left\{\ln\left[\langle \psi_n(\boldsymbol{\lambda}_0) | \psi_n(\boldsymbol{\lambda}_1)\rangle \langle \psi_n(\boldsymbol{\lambda}_1) | \psi_n(\boldsymbol{\lambda}_2)\rangle \ldots \langle \psi_n(\boldsymbol{\lambda}_N) | \psi_n(\boldsymbol{\lambda}_0)\rangle\right]\right\}\,. \tag{32}$$

Eicht man also die Kets über

$$|\psi_n(\boldsymbol{\lambda}_j)\rangle \mapsto |\psi_n'(\boldsymbol{\lambda}_j)\rangle = \exp(\mathrm{i}\phi_j)|\psi_n(\boldsymbol{\lambda}_j)\rangle\,, \tag{33}$$

um, so heben sich alle Faktoren $\exp(\mathrm{i}\phi_j)$ weg, weil jedes Ket zusammen mit einem Bra vorkommt und diese werden:

$$\langle \psi_n(\boldsymbol{\lambda}_j)| \mapsto \langle \psi_n'(\boldsymbol{\lambda}_j)| = \exp(-\mathrm{i}\phi_j)\langle \psi_n(\boldsymbol{\lambda}_j)|\,, \tag{34}$$

Damit ist der Ausdruck explizit eichinvariant. Die Berry-Phase ist damit unabhängig von der Eichung und somit unabhängig von der gewählten Beschreibung. (Eine Eichtransformation ist nichts anderes als eine Änderung der Beschreibung des Systems.) Sie ist somit eine physikalische Größe.

Aufgabe 37

Wir betrachten den Bahndrehimpuls $\mathbf{L}$ und den Spin $\mathbf{S}$. Diese koppeln zum Gesamtdrehimpuls $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$. J, L und S sind die Quantenzahlen von $\mathbf{J}$, $\mathbf{L}$ und $\mathbf{S}$; hierbei gilt $J = L + S$. Im Falle von Spin $1/2$ ist $S = 1/2$. L ist ganzzahlig und ≥ 0 und J halbzahlig und $\geq 1/2$ (wegen $J = L + S$). Die zugehörigen magnetischen Quantenzahlen sind $M_J \in \{-J, -J+1, \ldots, J\}$, $M_l \in \{-L, -L+1, \ldots, L\}$ und $S_z = \{-1/2, 1/2\}$ ist die Spin-Einstellung in Richtung der Quantisierungsachse (z-Achse). J kann die Werte $L + S$, $L + S - 1$, …, $|L - S|$ annehmen. Speziell für den Fall $L = 1$ und $S = 1/2$ (also den hier besprochenen) gilt

$$J \in \left\{\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\}, \quad M_{J=3/2} \in \left\{-\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}\right\}, \quad M_{J=1/2} \in \left\{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\}, \tag{35}$$

$$L \in \{0, 1\}, \quad M_{L=1} \in \{-1, 0, 1\}, \quad M_{L=0} \in \{0\}, \tag{36}$$

und

$$S = \frac{1}{2}, \quad S_z = \left\{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\}. \tag{37}$$

Wir werden von der Schreibweise

$$|J, M_J\rangle = |L, M_L\rangle \otimes |S, S_z\rangle, \tag{38}$$

Gebrauch machen. Außerdem benötigen wir

$$J_-|J, M_J\rangle = \hbar\sqrt{J(J+1) - M_J(M_J-1)}|J, M_J - 1\rangle, \tag{39a}$$

$$L_-|L, M_L\rangle = \hbar\sqrt{L(L+1) - M_L(M_L-1)}|L, M_L - 1\rangle, \tag{39b}$$

$$S_-|S, S_z\rangle = \hbar\sqrt{S(S+1) - S_z(S_z-1)}|S, S_z - 1\rangle. \tag{39c}$$

Den Zustand mit $J = 3/2$ und $M_j = 3/2$ enthält man durch Kombination von $(l, m_l) = (1, 1)$ und $(s, s_z) = (1/2, 1/2)$:

$$\boxed{\left|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right\rangle = \left|1, 1; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle.} \tag{40}$$

Eine Anwendung der Absteigeoperatoren liefert:

$$J_-\left|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right\rangle = \hbar\sqrt{\frac{3}{2}\cdot\frac{5}{2} - \frac{3}{2}\cdot\frac{1}{2}}\left|\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = \hbar\sqrt{3}\left|\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle. \tag{41}$$

Wir beachten, das $J_- = L_- + S_-$ und wenden diese Zerlegung auf die rechte Seite von (40) an:

$$L_-\left|1, 1; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = \hbar\sqrt{1\cdot 2 - 1\cdot 0}\left|1, 0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = \hbar\sqrt{2}\left|1, 0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle, \tag{42a}$$

$$S_-\left|1, 1; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = \hbar\sqrt{\frac{1}{2}\cdot\frac{3}{2} - \frac{1}{2}\cdot\left(-\frac{1}{2}\right)}\left|1, 1; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar\left|1, 1; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle. \tag{42b}$$

Damit gilt also:

$$\boxed{\left|\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}\left|1, 0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}\left|1, 1; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle.} \tag{43}$$

Eine erneute Anwendung der Absteigeoperatoren, dieses mal auf (43), führt zu:

$$J_-\left|\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = \hbar\sqrt{\frac{3}{2}\cdot\frac{5}{2} - \frac{1}{2}\cdot\left(-\frac{1}{2}\right)}\left|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = 2\hbar\left|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle, \tag{44a}$$

$$L_- \left|1,0;\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar\sqrt{1\cdot 2 - 0\cdot(-1)}\left|1,-1;\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar\sqrt{2}\left|1,-1;\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle\,, \tag{44b}$$

$$S_- \left|1,0;\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar\sqrt{\frac{1}{2}\cdot\frac{3}{2} - \frac{1}{2}\cdot\left(-\frac{1}{2}\right)}\left|1,0;\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar\left|1,0;\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\,, \tag{44c}$$

$$L_- \left|1,1;\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar\sqrt{1\cdot 2 - 1\cdot 0}\left|1,0,\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar\sqrt{2}\left|1,0,\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\,, \tag{44d}$$

$$S_- \left|1,1;\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle = 0\,. \tag{44e}$$

Damit können wir den neuen Zustand aufschreiben:

$$\left|\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{1}{2}\left\{\frac{2}{\sqrt{3}}\left|1,-1;\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}\left|1,0;\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}\left|1,0;\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\right\} =$$

$$= \boxed{\frac{1}{\sqrt{3}}\left|1,-1;\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}\left|1,0;\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\,.} \tag{45}$$

Eine letzte Anwendung auf (45) liefert dann:

$$J_- \left|\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar\sqrt{\frac{3}{2}\cdot\frac{5}{2} - \frac{3}{2}\cdot\frac{1}{2}}\left|\frac{3}{2},-\frac{3}{2}\right\rangle = \hbar\sqrt{3}\left|\frac{3}{2},-\frac{3}{2}\right\rangle\,, \tag{46a}$$

$$L_- \left|1,-1;\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle = 0\,, \tag{46b}$$

$$S_- \left|1,-1;\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar\left|1,-1;\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\,, \tag{46c}$$

$$L_- \left|1,0;\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar\sqrt{1\cdot 2 - 0\cdot(-1)}\left|1,-1;\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar\sqrt{2}\left|1,-1;\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\,, \tag{46d}$$

$$S_- \left|1,0;\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle = 0\,. \tag{46e}$$

$$\left|\frac{3}{2},-\frac{3}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\left\{\frac{1}{\sqrt{3}}\left|1,-1;\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle + \frac{2}{\sqrt{3}}\left|1,-1;\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\right\} = \boxed{\left|1,-1;\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\,.} \tag{47}$$

Zustände mit $J = 1/2$ erreicht man durch Absteigeoperatoren nicht, weil diese ja nur die M_J-Quantenzahl erniedrigen. Damit müssen wir den Zustand mit $(J, M_J) = (1/2, 1/2)$ aus Zuständen mit (l, m_l) und (s, s_z) konstruieren. $M_J = 1/2$ kann einerseits durch die Kombination $m_l = 1$ und $s_z = -1/2$ und andererseits durch $m_l = 0$ und $s_z = 1/2$ erreicht werden. Andere Möglichkeiten gibt es nicht. Damit muss gelten:

$$\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle = \alpha\left|1,0;\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle + \beta\left|1,1;\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\,. \tag{48}$$

Aus der Bedingung, dass dieser Zustand senkrecht auf $|3/2, 1/2\rangle$ steht und selbst normiert ist, also

$$\left\langle\frac{3}{2},\frac{1}{2}\middle|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle = \alpha\sqrt{\frac{2}{3}} + \beta\frac{1}{\sqrt{3}} \overset{!}{=} 0\,,\quad \left\langle\frac{1}{2},\frac{1}{2}\middle|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle \overset{!}{=} 1\,, \tag{49}$$

folgt ersten $\beta = -\sqrt{2}\alpha$ und schließlich $\alpha = 1/\sqrt{3}$ und $\beta = -\sqrt{2/3}$. Somit gilt:

$$\boxed{\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\left|1,0;\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}\left|1,1;\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\,.} \tag{50}$$

Erneute Anwendung der Absteigeoperatoren liefert

$$J_- \left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar\sqrt{\frac{1}{2}\cdot\frac{3}{2} - \frac{1}{2}\cdot\left(-\frac{1}{2}\right)}\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\,, \tag{51a}$$

$$L_- \left|1,0;\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar\sqrt{1\cdot 2 - 0\cdot(-1)}\left|1,-1;\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar\sqrt{2}\left|1,-1;\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle\,, \tag{51b}$$

$$S_- \left|1,0;\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar\left|1,0;\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\,, \tag{51c}$$

$$L_- \left|1,1;\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar\sqrt{1\cdot 2 - 1\cdot 0}\left|1,0;\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar\sqrt{2}\left|1,0;\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\,, \tag{51d}$$

$$S_- \left|1,1;\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle = 0\,. \tag{51e}$$

$$\begin{aligned}\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}}\left\{\sqrt{2}\left|1,-1;\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle + \left|1,0;\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\right\} - \sqrt{\frac{2}{3}}\cdot\sqrt{2}\left|1,0;\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle = \\ &= \boxed{\sqrt{\frac{2}{3}}\left|1,-1;\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}}\left|1,0;\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\,.}\end{aligned} \tag{52}$$

Nach der Phasenkonvention von Condon und Shortley wählt man die Koeffizienten $\langle L, M_L; S, S_z|J, M_J = J\rangle$ reell und positiv. Dann sind alle Clebsch-Gordon-Koeffizienten reell.