

KUGELFLÄCHENFUNKTIONEN

Wir stellen hier ein paar wenige Tatsachen zu den Kugelflächenfunktionen zusammen, da diese sowohl in der klassischen Feldtheorie als auch in der Quantenmechanik sehr häufig benötigt werden. Der hier gewählte Zugang ist von der Quantenmechanik her motiviert – man vergleiche das hier präsentierte mit dem aus der Elektrodynamik bekannten Material.

Definition der Kugelflächenfunktionen. Wann immer ein physikalische Problem einen erhaltenen Drehimpuls hat, sind sphärische Koordinaten (r, θ, ϕ) eine gute Wahl. Ein spinloses Teilchen, auf das ein sphärisch symmetrisches Potential wirkt, ist so ein Fall. Wir wissen, dass die *Schrödinger*-Gleichung für so ein Teilchen in sphärischen Koordinaten in einen radialen Anteil und einen vom Raumwinkel abhängigen Anteil separiert, so dass die Energie-Eigenfunktionen in der Ortsraumdarstellung geschrieben werden können als

$$\langle \mathbf{x} | \alpha, \ell, m \rangle = R_{\alpha\ell}(r) Y_{\ell}^m(\theta, \phi).$$

Hierbei ist die Position des Teilchens durch den Vektor \mathbf{x} in sphärischen Koordinaten (r, θ, ϕ) charakterisiert, und α bezeichnet alle weiteren Quantenzahlen außer ℓ, m , z.B. die radiale Quantenzahl für einen gebundenen Zustand oder die Energie einer Kugelwelle eines freien Teilchens. Diese Separierung des Hamiltonoperators H ist möglich, weil bei Rotationsinvarianz des Problems $[H, \mathbf{L}^2] = [H, L_z] = 0$. Die Eigenwerte von \mathbf{L}^2 sind dann natürlich $\hbar^2 \ell(\ell + 1)$, und die von L_z sind $\hbar m$, $-\ell \leq m \leq \ell$. Die Kugelflächenfunktionen sind dann nichts anderes als die Ortsraumdarstellung der Drehimpuls-Eigenzustände. Da die Eigenschaften des Systems bezüglich Drehungen nicht von der Entfernung vom Ursprung abhängen, interessiert nur die Winkelabhängigkeit, bzw. die Abhängigkeit von der Richtung, die eindeutig durch einen Einheitsvektor $\hat{\mathbf{n}}$ charakterisiert wird. Also sind die Kugelflächenfunktionen nichts anderes als

$$\langle \hat{\mathbf{n}} | \ell, m \rangle = Y_{\ell}^m(\theta, \phi) = Y_{\ell}^m(\hat{\mathbf{n}}),$$

wobei $|\hat{\mathbf{n}}\rangle$ ein Richtungs-Eigenzustand ist, analog zum Orts-Eigenzustand $|\mathbf{x}\rangle$. Die Kugelflächenfunktionen sind also die Wahrscheinlichkeitsamplituden dafür, dass die Drehimpuls-Eigenzustände gegeben durch ℓ, m in der Richtung $\hat{\mathbf{n}}$ gegeben durch θ, ϕ gefunden werden.

Explizite Form der Kugelflächenfunktionen. Die Aktion der Drehimpulsalgebra auf den Drehimpuls-Eigenzuständen erlaubt es, die explizite Form der $Y_{\ell}^m(\theta, \phi)$ zu bestimmen. Wir beginnen mit

$$L_z |\ell, m\rangle = \hbar m |\ell, m\rangle.$$

Multiplizieren mit $\langle \hat{\mathbf{n}} |$ von links und Einsetzen von L_z in der Darstellung in Kugelkoordinaten ergibt sofort

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \langle \hat{\mathbf{n}} | \ell, m \rangle = \hbar m \langle \hat{\mathbf{n}} | \ell, m \rangle.$$

Damit haben wir eine erste Differentialgleichung für die Kugelflächenfunktionen, nämlich $-i\partial_{\phi} Y_{\ell}^m(\theta, \phi) = m Y_{\ell}^m(\theta, \phi)$. Dies impliziert, dass die ϕ -Abhängigkeit der $Y_{\ell}^m(\theta, \phi)$ wie $e^{im\phi}$ sein muss. Entsprechend können wir aus

$$\mathbf{L}^2 |\ell, m\rangle = \hbar^2 \ell(\ell + 1) |\ell, m\rangle$$

auf die selbe Weise mit Einsetzen der Darstellung von \mathbf{L}^2 in Kugelkoordinaten genau die Differentialgleichung erhalten, die üblicherweise zur Definition der Kugelflächenfunktionen verwendet wird, nämlich

$$\left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \ell(\ell + 1) \right) Y_{\ell}^m(\theta, \phi) = 0.$$

Genauso übersetzt sich die Orthogonalitätsrelation der Drehimpuls-Eigenzustände,

$$\langle \ell', m' | \ell, m \rangle = \delta_{\ell'\ell} \delta_{m'm},$$

sofort in die Orthogonalitätsrelation der Kugelflächenfunktionen,

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d(\cos \theta) Y_{\ell'}^{m'}(\theta, \phi) Y_{\ell}^m(\theta, \phi) = \delta_{\ell'\ell} \delta_{m'm}, \quad (1)$$

wobei wir Gebrauch von der Vollständigkeitsrelation für die Richtungs-Eigenzustände gemacht haben (Ω bezeichnet den Raumwinkel),

$$\int d\Omega |\hat{\mathbf{n}}\rangle \langle \hat{\mathbf{n}}| = \mathbb{1}.$$

Um nun die Kugelflächenfunktionen explizit zu erhalten, beginnt man zweckmäßigerweise mit dem Höchstgewichtszustand $|\ell, \ell\rangle$, da dieser offensichtlich die Relation $L_+|\ell, \ell\rangle = 0$ erfüllt. Setzt man auch hier die Darstellung von L_+ in Kugelkoordinaten ein, so erhält man die Gleichung

$$-i\hbar e^{i\phi} \left(i\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \langle \hat{\mathbf{n}}|\ell, \ell\rangle = 0.$$

Die Abhängigkeit von ϕ kennen wir schon, sie muss sich wie $e^{i\ell\phi}$ verhalten, womit man leicht einsieht, dass diese partielle Differentialgleichung durch

$$\langle \hat{\mathbf{n}}|\ell, \ell\rangle = Y_\ell^\ell(\theta, \phi) = c_\ell e^{i\ell\phi} \sin^\ell\theta \quad (2)$$

gelöst wird. Die Konstante c_ℓ ist durch die Normierungsbedingung (1) festgelegt und ergibt sich zu

$$c_\ell = \frac{(-1)^\ell}{2^\ell \ell!} \sqrt{\frac{(2\ell+1)(2\ell)!}{4\pi}}.$$

Das Vorzeichen $(-1)^\ell$ wurde dabei so gewählt, dass am Schluss die $Y_\ell^{m=0}$ mit dem selben Vorzeichen wie die Legendre-Polynome $P_\ell(\cos\theta)$ herauskommen, deren Vorzeichen durch $P_\ell(1) = 1$ festgelegt ist. Ausgehend von (2) erhalten wir die anderen Kugelflächenfunktionen einfach durch Anwenden von L_- wie folgt:

$$\langle \hat{\mathbf{n}}|\ell, m-1\rangle = \frac{\langle \hat{\mathbf{n}}|\ell, m\rangle}{\hbar\sqrt{(\ell+m)(\ell-m+1)}} = \frac{1}{\sqrt{(\ell+m)(\ell-m+1)}} e^{-i\phi} \left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \langle \hat{\mathbf{n}}|\ell, m\rangle.$$

Das Resultat dieser Rekursionsbeziehung kann für $m \geq 0$ durch die explizite Formel

$$Y_\ell^m(\theta, \phi) = \frac{(-1)^\ell}{2^\ell \ell!} \sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell+m)!}{4\pi(\ell-m)!}} e^{im\phi} \frac{1}{\sin^m\theta} \frac{d^{\ell-m}}{d(\cos\theta)^{\ell-m}} (\sin\theta)^{2\ell}$$

angegeben werden. Die Y_ℓ^m für $m < 0$ sind dann gegeben durch die Beziehung

$$Y_\ell^{-m}(\theta, \phi) = (-1)^m (Y_\ell^m(\theta, \phi))^*.$$

Unabhängig davon, ob m positiv oder negativ ist, ist die θ -Abhängigkeit der Y_ℓ^m durch einen Faktor $(\sin\theta)^{|m|}$ mal ein Polynom in $\cos\theta$ vom Grade $\ell - |m|$ gegeben. Für $m = 0$ erhält man

$$Y_\ell^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} P_\ell(\cos\theta).$$

Kugelflächenfunktionen und Drehmatrizen. Es gibt einen interessanten Zusammenhang zwischen den Kugelflächenfunktionen und den Matrizen der irreduziblen Darstellungen von Drehungen. Ein Richtungsvektor $\hat{\mathbf{n}}$ kann immer durch eine Drehung R des Einheitsvektors in Richtung der z -Achse erhalten werden, d.h.

$$|\hat{\mathbf{n}}\rangle = \rho(R)|\hat{\mathbf{z}}\rangle.$$

Gibt man diese Drehung in Eulerwinkeln an, so zeigt sich, dass die Drehung gegeben ist durch eine Rotation um die y -Achse mit Winkel θ und einer anschließenden Rotation um die z -Achse mit Winkel ϕ . Also ist in der Euler-Notation die Drehung gegeben durch $\rho(R) = \rho(\alpha = \phi, \beta = \theta, \gamma = 0)$. Wir können obige Gleichung durch Einschleiben einer Eins auch in der Form

$$|\hat{\mathbf{n}}\rangle = \sum_{\ell', m'} \rho(R)|\ell', m'\rangle \langle \ell', m'|\hat{\mathbf{z}}\rangle$$

schreiben. Der Richtungs-Eigenzustand $|\hat{\mathbf{n}}\rangle$, entwickelt in Drehimpuls-Eigenzustände, enthält also sämtliche ℓ -Werte. Wenn wir das aber von links mit $\langle \ell, m|$ multiplizieren, überlebt nur ein solcher ℓ -Wert,

$$\langle \ell, m|\hat{\mathbf{n}}\rangle = \sum_{m'} \rho_{mm'}^{(\ell)}(\alpha = \phi, \beta = \theta, \gamma = 0) \langle \ell, m'|\hat{\mathbf{z}}\rangle. \quad (3)$$

Nun ist $\langle \ell, m' | \hat{\mathbf{z}} \rangle$ einfach eine Zahl, und zwar nichts anderes, als $Y_\ell^{m'^*}(\theta = 0, \phi)$ mit unbestimmtem ϕ . Nun verschwinden aber die $Y_\ell^m(\theta = 0, \phi)$ für $m \neq 0$, da ja $|\hat{\mathbf{z}}\rangle$ ein Eigenzustand von $L_z = xp_y - yp_x$ mit Eigenwert null ist. Also ist

$$\langle \ell, m' | \hat{\mathbf{z}} \rangle = Y_\ell^{m'^*}(\theta = 0, \phi) \delta_{m',0} = \sqrt{\frac{(2\ell+1)}{4\pi}} P_\ell(\cos \theta) \Big|_{\cos \theta=1} \delta_{m',0} = \sqrt{\frac{(2\ell+1)}{4\pi}} \delta_{m',0}.$$

Einsetzen in (3) liefert dann

$$Y_\ell^{m'^*}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{(2\ell+1)}{4\pi}} \rho_{m',0}^{(\ell)}(\alpha=\phi, \beta=\theta, \gamma=0) \quad \text{bzw.} \quad \rho_{m,0}^{(\ell)}(\alpha, \beta, \gamma=0) = \sqrt{\frac{4\pi}{(2\ell+1)}} Y_\ell^{m*}(\theta, \phi) \Big|_{\theta=\beta, \phi=\alpha}.$$

Der Fall $m = 0$ ist besonders wichtig, $\rho_{0,0}^{(\ell)}(\beta) \Big|_{\beta=\theta} = P_\ell(\cos \theta)$.

CAMPBELL-BAKER-HAUSDORFF FORMEL

Mit Hilfe der Exponential-Abbildung können wir Elementen einer Lie-Algebra \mathfrak{g} Elemente der zugehörigen Lie-Gruppe G zuordnen. Wie ist aber das Gruppengesetz implementiert, d.h. wie findet man das Element $Z \in \mathfrak{g}$, so dass $\exp(X) \cdot \exp(Y) = \exp(Z)$ ist? In der Quantenmechanik bilden die Observablen eine (Darstellung auf einem Hilbertraum \mathcal{H} einer) Lie-Algebra und die (Darstellung auf einem Hilbertraum \mathcal{H} der) zugehörige(n) Lie-Gruppe. Die Lie-Gruppe kann ggfls. eine zentralen Erweiterung besitzen. Wir haben in Quantenmechanik I gelernt, dass für $[X, Y] \neq 0$ eben auch $\exp(X) \cdot \exp(Y) \neq \exp(X+Y)$ ist. Wenn allerdings $[X, Y] = c \cdot 1$ eine reine c-Zahl ergibt, die dann natürlich mit allen Operatoren kommutiert, hat man das noch relativ einfache Resultat $\exp(X) \cdot \exp(Y) = \exp(X+Y + \frac{1}{2}[X, Y])$.

Allgemeiner Fall. Explizit kann man das Element Z bestimmen, wenn man die Lie-Gruppe (und ihre Algebra) durch Matrizen realisieren kann. In den interessanten Fällen in der Quantenmechanik ist genau dies möglich, ggfls. mit unendlich-dimensionalen Matrizen. Meist zerfällt jedoch der Hilbertraum \mathcal{H} bezüglich der konkret betrachteten Operatoren in endlich-dimensionale Blöcke, so dass man letztlich doch nur das Problem für endlich-dimensionale Matrizen betrachten muss. Dann ist die Exponential-Abbildung nichts anderes, als

$$\exp(X) = \sum_n \frac{1}{n!} X^n.$$

Dies konvergiert und ist invertierbar mit Inversem $\exp(-X)$, wenn X eine Matrix-Darstellung eines Elementes einer Lie-Algebra ist. Offensichtlich ist infinitesimal $(d \exp)_0 = 1$, d.h. die Exponential-Abbildung bildet den Ursprung der Lie-ALgebra (diese ist bekanntermaßen auch ein Vektorraum, der Ursprung ist das neutrale Element der Algebra) auf das Eins-Element der zugehörigen Lie-Gruppe ab. Für die Ein-Parameter-Untergruppen erhält man sofort

$$\exp(\lambda X) \exp(\mu X) = \sum_n \sum_m \frac{1}{n!} \frac{1}{m!} \lambda^n \mu^m X^{n+m} = \sum_N \sum_{k=0}^N \frac{1}{N!} \binom{N}{k} \lambda^k \mu^{N-k} X^N = \sum_N (\lambda + \mu)^N X^N = \exp((\lambda + \mu)X).$$

Dies ist der einfache Fall, da die Ein-Parameter-Untergruppen abelsch sind. Allerdings steckt tatsächlich die gesamte Gruppenstruktur bereits in der Lie-Algebra. Dazu seien X, Y aus einer hinreichend kleinen Umgebung der $0 \in \mathfrak{g}$ gewählt. Weiter betrachte man für $g \in G \subset GL_n \mathbb{R}$ die Abbildung

$$\log(g) = - \sum_n \frac{(-)^n}{n} (g - e)^n \in \mathfrak{gl}_n \mathbb{R},$$

die natürlich nur für solche g gültig ist, die in einer hinreichend kleinen Umgebung des Eins-Elements liegen. Dort, wo sie definiert ist, ist diese Abbildung natürlich das Inverse der Exponential-Abbildung. Damit definiert man nun das *Baker-Campbell-Hausdorff-Produkt*

$$X * Y = \log(\exp(X) \cdot \exp(Y)).$$

Der entscheidende Punkt ist nicht das explizite Aussehen von $X * Y$, sondern dass das Resultat allein von X, Y und den Operationen $\text{ad}(X)$ und $\text{ad}(Y)$ abhängt. Für unsere Zwecke ist $\text{ad}(X)$ nichts weiter als eine praktische

Notation der linearen Abbildung, die der Lie-Klammer entspricht, d.h. $\text{ad}(X)(Y) = \text{ad}X(Y) = [X, Y]$. Die ersten Terme sehen wie folgt aus:

$$\begin{aligned} X * Y &= (X + Y) + \frac{1}{2}[X, Y] + \frac{1}{12}([X, [X, Y]] + [Y, [Y, X]]) + \dots \\ &= (X + Y) + \frac{1}{2}\text{ad}(X)(Y) + \frac{1}{12}(\text{ad}(\text{ad}(X))(Y) + \text{ad}(\text{ad}(Y))(X)) \dots \\ &= \left(1 + \frac{1}{4}(\text{ad}X - \text{ad}Y) + \frac{1}{12}(\text{ad}^2 X + \text{ad}^2 Y) + \dots\right)(X + Y). \end{aligned}$$

Insbesondere treten also keine Objekte wie X^n allein auf, sondern alle Terme lassen sich so zusammenfassen, dass sie gänzlich durch Elemente der Lie-Algebra und deren Lie-Klammern ausgedrückt werden können. Der Beweis solcher Formeln ist nicht einfach, aber Dynkin hat eine geschlossene Form des B-C-H-Produktes angeben können. Dieser Handout schließt mit der unkommentierten Angabe einer Integral-Darstellung des B-C-H-Produktes,

$$X * Y = X + \int_0^1 g(\exp(\text{ad}X) \cdot \exp(t\text{ad}Y))(Y) dt, \quad g(z) = \frac{\log(z)}{1 - \frac{1}{z}} = 1 - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-)^n}{n(n+1)}(z-1)^n.$$

Der entscheidende Punkt ist, dass X und Y selbst nur linear auftreten, und ansonsten nur noch Kommutator-Operationen (Lie-Klammern). Man sieht außerdem, dass die Reihenentwicklung Sinn macht, da der Eins-Element-Term sich weghebt,

$$X * Y = X + Y + \int_0^1 dt \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-)^{n+1}}{n(n+1)} (\exp(\text{ad}X) \cdot \exp(t\text{ad}Y) - e)^n (Y).$$

Eine nützliche Formel. In der Quantenmechanik tritt sehr häufig der Fall auf, dass man eine gegebene Observable mittels einer unitären Abbildung transformieren möchte, d.h. $A \mapsto UAU^+$. Ist nun U wiederum gegeben als Exponential einer infinitesimalen Transformation, $U = U_\lambda(X) = \exp(i\lambda X)$, so möchte man einen expliziten Ausdruck für $\exp(i\lambda X)A \exp(-i\lambda X)$ angeben. Hierbei ist natürlich X ein hermitescher Operator und λ ein reeller Parameter für die Ein-Parameter-Untergruppe, die von X generiert wird. Hier haben wir die in der Physik übliche Konvention gewählt, dass die Generatoren der Transformationen hermitesch gewählt werden, in der Mathematik verwendet man oft die umgekehrte Konvention, d.h. anti-hermitesche Generatoren. Man findet

$$\begin{aligned} \exp(i\lambda X)A \exp(-i\lambda X) &= A + i\lambda[X, A] + \frac{(i\lambda)^2}{2!}[X, [X, A]] + \dots + \frac{(i\lambda)^n}{n!}[X, [X, [X, \dots [X, A]]] \dots] + \dots \\ &= \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\lambda)^n}{n!} \text{ad}^n X \right) (A) \\ &= \exp(i\lambda \text{ad}X)A, \end{aligned}$$

was einmal mehr zeigt, wie nützlich die Notation $\text{ad}(X)(\cdot) = \text{ad}X(\cdot)$ für den Kommutator $[X, \cdot]$ ist.