4 Drehimpuls

Motivation:

- Für ein rotationssymmetrische Potential $V(r = |\vec{x}|)$ ist der Drehimpuls $\vec{L}$ eine Erhaltungsgröße.
- Stationäre Zustände (z.B. das Wasserstoff) werden daher durch ihre Energie- und Drehimpuls-quantenzahlen charakterisiert.

4.1 Drehimpuls in quantenmechanischer Beschreibung

- Der **Bahndrehimpulsoperator** eines Teilchens ist

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{x}} \times \hat{\vec{p}} = \sum_{ijk} \varepsilon_{ijk} r_i p_j \vec{e}_k \qquad \begin{pmatrix} L_x \\ L_y \\ L_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} yp_z - zp_y \\ zp_x - xp_z \\ xp_y - yp_x \end{pmatrix}$$

Die Komponenten des Bahndrehimpulses erfüllen die Kommutatorrelation

$$[L_i, L_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk} L_k$$

also

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z \qquad \text{und zyklisch}$$

Beweis:

$$\begin{aligned} [L_x, L_y] &= [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z] \\ &= y[p_z, z]p_x + x[z, p_z]p_y \\ &= i\hbar(xp_y - yp_x) \end{aligned}$$

- Allgemeiner: Drei Operatoren J_x, J_y, J_z werden als **Drehimpulsoperatoren** bezeichnet, wenn sie diese Kommutatorrelation erfüllen:

$$[J_i, J_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}J_k \qquad \text{also} \qquad [J_x, J_y] = i\hbar J_z \quad \text{(und zyklisch)}$$

- Das **Betragsquadrat des Drehimpulsoperators** $\vec{J} = \begin{pmatrix} J_x \\ J_y \\ J_z \end{pmatrix}$ ist

$$\vec{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$$

und erfüllt

$$[\vec{J}^2, J_i] = 0 \qquad \text{für} \quad i = x, y, z.$$

Beweis für $i = x$:

$$\begin{aligned}[J_x^2 + J_y^2 + J_z^2, J_x] &= J_y[J_y, J_x] + [J_y, J_x]J_y + J_z[J_z, J_x] + [J_z, J_x]J_z \\ &= -i\hbar J_y J_z - i\hbar J_z J_y + i\hbar J_z J_y + i\hbar J_y J_z = 0\end{aligned}$$

Es gibt daher gemeinsame Eigenvektoren von $\{\vec{J}^2, J_i\}$ mit $i = x, y, z$. (Wegen $[J_i, J_j] \neq 0$ sind diese Eigenzustände nicht für alle i gleich!).

4.2 Drehimpulseigenzustände und -werte

Ziel: Bestimmen der gemeinsamen Eigenzustände und Eigenwerte der kommutierenden Operatoren $\{\vec{J}^2, J_z\}$.

- Wir definieren die **Auf- und Absteigeoperatoren**

$$J_+ = J_x + iJ_y \qquad J_- = J_+^\dagger = J_x - iJ_y$$

Es gelten die Kommutatorrelationen

$$[J_z, J_\pm] = \pm\hbar J_\pm \qquad [J_+, J_-] = 2\hbar J_z$$

wegen

- $[J_z, J_x \pm iJ_y] = [J_z, J_x] \pm i[J_z, J_y] = i\hbar J_y \pm i(-i\hbar J_x) = \pm\hbar(J_x \pm iJ_y)$
- $[J_+, J_-] = [J_x + iJ_y, J_x - iJ_y] = -i[J_x, J_y] + i[J_y, J_x] = 2\hbar J_z$

Bemerkung: Aufgrund dieser Kommutatorrelationen bilden die Operatoren $\{J_+, J_-, J_z\}$ eine sogenannte „su(2) - Lie - Algebra".

- Weiters gelten die Eigenschaften:

$$[\vec{J}^2, J_\pm] = 0 \qquad J_\pm J_\mp = \vec{J}^2 - J_z^2 \pm \hbar J_z \qquad \vec{J}^2 = \tfrac{1}{2}(J_+J_- + J_-J_+) + J_z^2$$

  wegen
  - $[\vec{J}^2, J_\pm] = [\vec{J}^2, J_x \pm iJ_y] = 0$
  - $J_\pm J_\mp = (J_x \pm iJ_y)(J_x \mp iJ_y) = J_x^2 + J_y^2 \mp i[J_x, J_y] = \vec{J}^2 - J_z^2 \pm \hbar J_z$

- $\hbar$ hat die Einheit eines Drehimpulses. Für die gemeinsamen Eigenzustände/Eigenwerte von $\vec{J}^2$ und J_z setzen wir daher an

$$\vec{J}^2 |\psi\rangle = \hbar^2\lambda |\psi\rangle \qquad \lambda \in \mathbb{R}$$

$$J_z |\psi\rangle = \hbar m |\psi\rangle \qquad m \in \mathbb{R}$$

- Für die Eigenwerte von $\vec{J}^2$ gilt

$$\lambda \geq 0$$

  wegen
  - $0 \leq \| J_i |\psi\rangle \|^2 = \langle\psi|J_i^2|\psi\rangle$ für alle $i = x, y, z$
  - $\hbar^2\lambda \langle\psi|\psi\rangle = \langle\psi|\vec{J}^2|\psi\rangle = \sum_i \langle\psi|J_i^2|\psi\rangle \geq 0$

- Es ist zweckmäßig, für die Eigenwerte von $\vec{J}^2$ den Ansatz

$$\vec{J}^2 \,|\psi\rangle = \hbar^2 j(j+1)\,|\psi\rangle \qquad\qquad j \geq 0$$

zu machen. Das geschieht ohne Beschränkung der Allgemeinheit, weil die Gleichung $\lambda = j(j+1)$ für alle $\lambda \geq 0$ eine eindeutige Lösung mit $j \geq 0$ besitzt.

- Wir suchen also Eigenzustände/Eigenwerte von $\{\vec{J}^2, J_z\}$

$$\begin{aligned} \vec{J}^2 \,|jm\alpha\rangle &= \hbar^2 j(j+1)\,|jm\alpha\rangle & \qquad j &\geq 0 \\ J_z \,|jm\alpha\rangle &= \hbar m \,|jm\alpha\rangle & \qquad m &\in \mathbb{R} \end{aligned}$$

α ist ein Entartungsindex, den wir im Folgenden vorerst unterdrücken (siehe später)

- Es gilt

$$-j \leq m \leq j \qquad (*)$$

Beweis:

$$\begin{aligned} 0 &\leq \|J_\pm\,|jm\rangle\,\|^2 = \langle jm|J_\pm^\dagger J_\pm|jm\rangle = \langle jm|J_\mp J_\pm|jm\rangle = \langle jm|\vec{J}^2 - J_z^2 \pm \hbar J_z|jm\rangle \\ &= [\hbar^2 j(j+1) - \hbar^2 m^2 \pm \hbar^2 m]\,\langle jm|jm\rangle \\ &= \hbar^2[j(j+1) - m(m\mp 1)] \end{aligned}$$

Also gilt für alle m

$$j(j+1) - m(m-1) = (j-m)(j+m+1) \geq 0 \qquad \text{(i)}$$
$$j(j+1) - m(m+1) = (j-m+1)(j+m) \geq 0 \qquad \text{(ii)}$$

bzw.

$$-(j+1) \leq m \leq j \qquad \text{(i)}$$
$$-j \leq m \leq j+1 \qquad \text{(ii)}$$

also

$$-j \leq m \leq j$$

- Es gilt

$$m = -j \qquad \longleftrightarrow \qquad J_- \, |j,m\rangle = 0$$

wegen

“$\rightarrow$” $\qquad \| J_- \, |j,-j\rangle \, \|^2 = \langle j,-j|J_+J_-|j,-j\rangle = \hbar^2[j(j+1) + j(-j-1)] = 0$

“$\leftarrow$” $\qquad 0 = J_+J_- \, |jm\rangle = (\vec{J}^2 - J_z^2 + \hbar J_z) \, |jm\rangle = \hbar^2[j(j+1) - m^2 + m] \, |jm\rangle$

also $\quad j(j+1) - m^2 + m = 0$ und $m = -j$

- Analog gilt

$$J_+ |jm\rangle = 0 \quad \longleftrightarrow \quad m = +j$$

- Für $m > -j$ gilt: $J_- |jm\rangle$ ist ein Eigenzustand von $\vec{J}^2$ und J_z zu den Eigenwerten $\hbar^2 j(j+1)$ und $\hbar(m-1)$

$$\vec{J}^2 J_- |jm\rangle = \hbar j(j+1) J_- |jm\rangle$$
$$J_z J_- |jm\rangle = \hbar(m-1) J_- |jm\rangle$$

Wegen $[\vec{J}^2, J_-] = 0$ gilt $\vec{J}^2 J_- |jm\rangle = J_- \vec{J}^2 |jm\rangle = \hbar^2 j(j+1) J_- |jm\rangle$
und wegen $[J_z, J_-] = -\hbar J_-$ gilt $J_z J_- |jm\rangle = (J_- J_z - \hbar J_-) |jm\rangle = \hbar(m-1) J_- |jm\rangle$

- Analog gilt für $m < j$: $J_+ |jm\rangle$ ist ein Eigenzustand von $\vec{J}^2$ und J_z zu den Eigenwerten $\hbar^2 j(j+1)$ und $\hbar(m+1)$

$$\vec{J}^2 J_+ |jm\rangle = \hbar j(j+1) J_+ |jm\rangle$$
$$J_z J_+ |jm\rangle = \hbar(m+1) J_+ |jm\rangle$$

- Damit können durch wiederholtes Anwenden von $J_\pm$ aus einem gegebenen Eigenzustand $|jm\rangle$ neue Eigenzustände $J_-^p\,|jm\rangle$ bzw. $J_+^q\,|jm\rangle$ mit $p, q \in \mathbb{N}$ zu Eigenwerten $\hbar(m-p)$ bzw. $\hbar(m+q)$ bzgl. J_z erzeugen.
- Es gilt: j entweder ganzzahlig oder halbzahlig

$$j = 0, \tfrac{1}{2}, 1, \tfrac{3}{2}, 2, \ldots$$

Sei insbesondere $p \in \mathbb{N}$ so gewählt, dass

$$-j \leq m - p \leq -j + 1$$

Der Vektor $J_-(J_-)^p\,|jm\rangle$ ist dann ein Eigenzustand von J_z zum Eigenwert

$$m - p - 1 \leq -j$$

im Widerspruch zu Gleichung ($*$). Also muss $m - p = -j$ gelten, denn dann ist $J_-(J_-)^p\,|jm\rangle = J_-\,|j, m-p\rangle = J_-\,|j, -j\rangle = 0$. Es gibt also immer ein $p \in \mathbb{N}$ so, dass

$$m - p = -j.$$

Mit analoger Überlegungen für $(J_+)^q\,|jm\rangle$ zeigt man, dass immer auch ein $q \in \mathbb{N}$ existiert so, daß

$$m + q = +j$$

Damit gilt

$$p + q = 2j \qquad \text{für } p, q \in \mathbb{N}.$$

Also ist j entweder ganzzahlig oder halbzahlig.

- Damit ist wegen

$$m = j + p \qquad \text{bzw.} \qquad m = j - q \qquad p, q \in \mathbb{N}$$

auch m ganz- oder halbzahlig. Für gegebenes j ist wegen $-j \leq m \leq +j$

$$m = -j,\ (-j+1),\ (-j+2),\ \ldots,\ (j-2),\ (j-1),\ j$$

- Die **Standardbasis für Drehimpulsoperatoren** ist

$$\vec{J}^2\,|jm\rangle = \hbar^2 j(j+1)\,|jm\rangle \qquad\qquad J_z\,|jm\rangle = \hbar m\,|jm\rangle$$

wobei $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \ldots$ und $-j \leq m \leq j$ für festes j. Weiters gilt für $J_\pm = J_x \pm iJ_y$

$$J_+\,|jm\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\,|j, m+1\rangle$$
$$J_-\,|jm\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\,|j, m-1\rangle$$

Die damit erzeugten Zustände $|j, m \pm 1\rangle$ sind normiert

$$\langle j, m \pm 1 | j, m \pm 1\rangle = \frac{1}{\hbar^2[j(j+1) - m(m \pm 1)]}\,\langle jm|J_\mp J_\pm|jm\rangle = 1.$$

Diese Zustände sind orthonormal $\langle jm|j'm'\rangle = \delta_{jj'}\delta_{mm'}$.

Bemerkung: Die Zustände können immer entartet sein. Eigentlich sollten wir $|jm, \alpha\rangle$ verwenden. Obige Relationen gelten für festen Entartungsindex α.

4.3 Bahndrehimpuls

- In Ortsdarstellung ist der Bahndrehimpulsoperator $\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{x}} \times \hat{\vec{p}}$

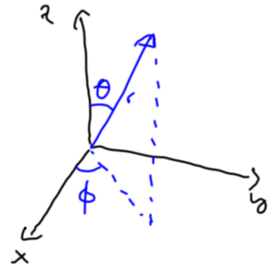
$$L_i = -i\hbar \sum_{jk} \varepsilon_{ijk} x_j \partial_{x_k} \qquad \left(\partial_x := \frac{\partial}{\partial x_k}\right)$$

In Kugelkoordinaten findet man

$$L_z = -i\hbar\partial_\phi$$

$$L_x = i\hbar\left(\sin\phi\partial_\theta + \frac{\cos\phi}{\tan\theta}\partial_\phi\right)$$

$$L_y = i\hbar\left(-\cos\phi\partial_\theta + \frac{\sin\phi}{\tan\theta}\partial\phi\right)$$



bzw.

$$\vec{L}^2 = -\hbar^2\left(\partial_\theta^2 + \frac{1}{\tan\theta}\partial_\theta + \frac{1}{\sin^2\theta}\partial_\phi^2\right) \qquad L_\pm = \hbar e^{\pm i\phi}(\pm\partial_\theta + i\cot\theta\partial_\phi)$$

- Die Eigenwertgleichungen für $\vec{L}^2$ und L_z lauten in Ortsdarstellung

$$\psi_{lm\alpha}(r,\theta,\phi) = \langle \vec{x}|lm\alpha\rangle$$

$$-\left[\partial_\theta^2 + \frac{1}{\tan\theta}\partial_\theta + \frac{1}{\sin^2\theta}\partial_\phi^2\right]\psi_{lm\alpha}(r,\theta,\phi) = l(l+1)\psi_{lm\alpha}(r,\theta,\phi)$$
$$-i\partial_\phi\psi_{lm\alpha}(r,\theta,\phi) = m\psi_{lm\alpha}(r,\theta,\phi)$$

- Die radiale Variable kommt nicht vor. Wir machen daher einen Separationsansatz

$$\psi_{lm\alpha}(r,\theta,\phi) = R_{lm\alpha}(r)Y_l^m(\theta,\phi) \quad \in \quad L^2(\mathbb{R}^3)$$

mit

$$\int_0^\infty \mathrm{d}r\, r^2|R(r)|^2 \int_{4\pi} \mathrm{d}\Omega\, |Y_l^m(\theta,\phi)|^2 < \infty$$

Die Eigenwertgleichung von L_z ergibt

$$\partial_\phi Y_l^m(\theta,\phi) = imY_l^m(\theta,\phi)$$

d.h.

$$Y_l^m(\theta,\phi) = F_l^m(\theta)e^{im\phi}$$

Der Wertebereich von ϕ ist $[0, 2\pi]$, wobei wir fordern $\psi(r,\theta,\phi) = \psi(r,\theta,\phi+2\pi)$ d.h.

$$e^{im\phi} \stackrel{!}{=} e^{im(\phi+2\pi)}$$

bzw.

$$e^{2im\pi} = 1 \qquad \text{also} \quad m = 0, 1, 2, \dots$$

Weil m und l entweder beide ganz- oder halbzahlig sind, gilt:

Für **Bahndrehimpulszustände** sind nur **ganzzahlige** Eigenwerte von $\vec{L}^2$ und L_z realisiert

$$l = 0, 1, 2, \dots$$
$$m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$$

- Die Eigenfunktion $Y_l^{m=+l}(\theta,\phi)$ folgt aus

$$L_+ Y_l^l(\theta,\phi) = 0$$

Wegen $Y_l^l(\theta,\varphi) = F_l^l(\theta) e^{il\phi}$ ist das äquivalent zu

$$(\partial_\theta - l\cos\theta) F_l^l(\theta) = 0$$

mit der **eindeutigen** Lösung $F_l^l(\theta) = c_l (\sin\theta)^l$ mit Normierungskonstante c_l. Also ist

$$Y_l^l(\theta,\phi) = c_l e^{il\phi} (\sin\theta)^l$$

- Auf- und Absteigeoperatoren erfüllen

$$L_\pm Y_l^m(\theta,\phi) = \hbar\sqrt{l(l+1)-m(m\pm 1)}\,Y_l^{m\pm 1}(\theta,\phi)$$

Durch wiederholtes Anwenden von

$$L_- = \hbar e^{-i\phi}(-\partial_\theta + i\cot\theta\,\partial_\phi)$$

können alle Zustände $Y_l^m(\theta,\phi)$ aus $Y_l^l(\theta,\phi)$ erzeugt werden.
Ergebnis sind **Kugelflächenfunktionen**

$$Y_l^m = c_l^m e^{im\phi}(\sin\theta)^{-m}\frac{\mathrm{d}^{l-m}}{\mathrm{d}(\cos\theta)^{l-m}}(\sin\theta)^{2l}$$

mit

$$l = 0,1,2,\ldots \qquad\qquad m = -l,-l+1,\ldots,l-1,l$$

und Normierungskonstanten

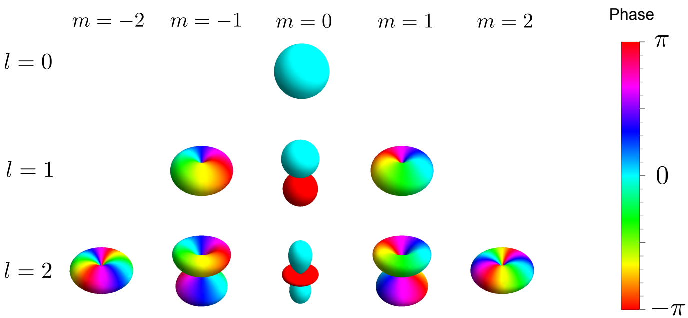
$$c_l^m = \frac{(-1)^l}{2^l l!}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}}$$

Die Normierung ist so gewählt, dass

$$\int_{4\pi}\mathrm{d}\Omega\left(Y_{l'}^{m'}(\theta,\phi)\right)^*\left(Y_l^m(\theta,\phi)\right) = \delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

- Die Kugelflächenfunktionen $Y_l^m(\theta, \phi)$ niedrigster Ordnung sind:

	$m = 0$	$m = \pm 1$	$m = \pm 2$
$l = 0$	$\dfrac{1}{\sqrt{4\pi}}$		
$l = 1$	$\sqrt{\dfrac{3}{4\pi}}\cos\theta$	$\mp\sqrt{\dfrac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm i\phi}$	
$l = 2$	$\sqrt{\dfrac{5}{16\pi}}\left(\cos^2\theta - 1\right)$	$\mp\sqrt{\dfrac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta e^{\pm i\phi}$	$\sqrt{\dfrac{15}{32\pi}}\sin^2\theta e^{\pm 2i\phi}$



- Jede Wellenfunktion

$$\psi_{lm\alpha}(r,\theta,\phi) = \langle \vec{x}|lm\alpha\rangle = R_{lm\alpha}(r)Y_l^m(\theta,\phi)$$

  ist ein Eigenzustand von $\vec{L}^2$ und L_z. D.h. $\vec{L}^2$ und L_z bilden kein VSKO in $L^2(\mathbb{R}^3)$.

- Eigenschaften der Zustände $\psi_{lm\alpha}(r,\theta,\phi)$

  - Mittelwerte

$$\langle L_z\rangle = \hbar m \qquad\qquad \langle L_x\rangle = \langle L_y\rangle = 0$$

  - Varianz

$$\Delta L_z^2 = 0 \qquad\qquad \Delta L_x^2 = \Delta L_y^2 = \hbar^2 \frac{l(l+1)-m^2}{2}$$

  - Betragsquadrat des Drehimpulsvektors

$$\langle \vec{L}^2\rangle = \hbar^2 l(l+1)$$