

4 Drehimpuls

Motivation:

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

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

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:

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

- 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

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

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**

$$J_+ = J_x + iJ_y$$

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

Es gelten die Kommutatorrelationen

$$[J_z, J_\pm] = \pm \hbar J_\pm$$

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

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:

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

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

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

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

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

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

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

zu machen. Das geschieht ohne Beschränkung der Allgemeinheit, da 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 $\{\vec{J}^2, J_z\}$

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

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

- Es gilt

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

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

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

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

bzw.

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

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

also

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

• Es gilt

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

wegen

$$\text{"}\rightarrow\text{"} \quad \|J_- |j, -j\rangle\|^2 = \langle j, -j | J_+ J_- |j, -j\rangle = \hbar^2 [j(j+1) + j(-j-1)] = 0$$

$$\text{"}\leftarrow\text{"} \quad 0 = J_+ J_- |jm\rangle = (\vec{J}^2 - J_z^2 + \hbar J_z) |jm\rangle = \hbar^2 [j(j+1) - m^2 + m] |jm\rangle$$

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

- 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 $\hbar(m-1)$

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

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 $\hbar(m+1)$

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

- 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

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$$

Sei $|jm\rangle$ Eigenzustand von J_z zum Eigenwert $\hbar m$. Wir wählen ein $p \in \mathbb{N}$ so, dass

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

Falls $-j < m - p < -j + 1$, dann ist der Vektor $J_-(J_-)^p |jm\rangle$ ein Eigenzustand von J_z zum Eigenwert $m - p - 1 < -j$ 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

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

Also ist j entweder ganzzahlig oder halbzahlig.

- Damit ist wegen

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

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

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

- Die **Standardbasis für Drehimpulsoperatoren** ist

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

$$J_z |jm\rangle = \hbar m |jm\rangle$$

wobei $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$ 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 $\hat{L} = \hat{x} \times \hat{p}$

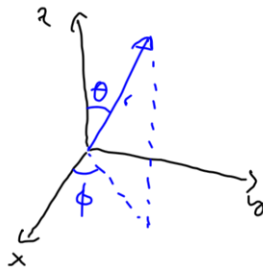
$$L_i = -i\hbar \sum_{jk} \varepsilon_{ijk} x_j \partial_{x_k} \quad \left(\partial_x := \frac{\partial}{\partial x_k} \right)$$

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.

$$\vec{L}^2 = -\hbar^2 \left(\partial_\theta^2 + \frac{1}{\tan \theta} \partial_\theta + \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial_\phi^2 \right)$$

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

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

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

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

- 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

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

Die Eigenwertgleichung von L_z ergibt

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

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.

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

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**

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

mit

$$l = 0, 1, 2, \dots$$

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

und Normierungskonstanten

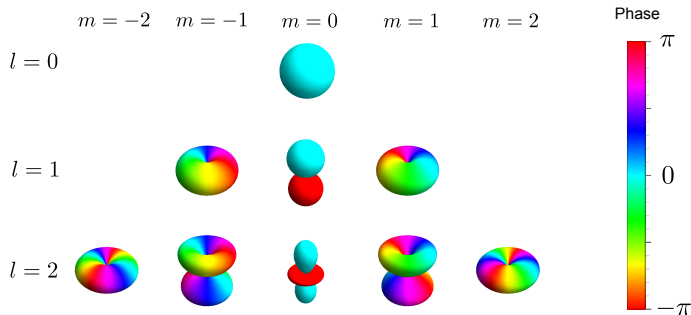
$$c_l^m = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}}$$

Die Normierung ist so gewählt, dass

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

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

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



- 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

$$\langle L_z \rangle = \hbar m$$

$$\langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = 0$$

- Varianz

$$\Delta L_z^2 = 0$$

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

- Betragsquadrat des Drehimpulsvektors

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