VI Drehimpuls

1 Einführung

Der Drehimpuls ist wie Energie und Impuls verknüpft mit grundlegenden Symmetrien, Observablen und Erhaltungsgrößen. Wir werden hier zunächst den Bahndrehimpuls betrachten, Verallgemeinerungen wie der Spin kommen später.
Klassisch schreibt sich der Drehimpuls

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}. \tag{VI.1}$$

In der Quantenmechanik wird dies zu

$$\vec{L} \longrightarrow \hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}, \tag{VI.2}$$

d.h.

$$\hat{L}_j = \sum_{k,l=1}^{3} \varepsilon_{jkl}\ \hat{x}_k \hat{p}_l \tag{VI.3}$$

zum Beispiel

$$\hat{L}_1 = \hat{x}_2 \hat{p}_3 - \hat{x}_3 \hat{p}_2. \tag{VI.4}$$

Man beachte hierbei, dass $[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0$ sowie für $i \neq j$: $[\hat{p}_i, \hat{x}_j] = 0$. Es gilt außerdem

$$\hat{\vec{L}}^2 = \hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2 + \hat{L}_3^2 \tag{VI.5}$$

$$\text{und } [\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i\hbar \sum_{l=1}^{3} \varepsilon_{jkl} \hat{L}_l \tag{VI.6}$$

$$\text{z.B. } [\hat{L}_1, \hat{L}_2] = i\hbar \hat{L}_3; \quad [\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_k] = 0 \tag{VI.7}$$

Für die Unschärfebeziehung gilt

$$\Delta L_1 \cdot \Delta L_2 \geq \frac{\hbar}{2} |\langle L_3 \rangle|. \tag{VI.8}$$

(Diese Beziehung ist zyklisch, die Indizes lassen sich also „durchrotieren “.)

Die drei Komponenten des Drehimpulses sind also nicht gleichzeitig scharf messbar! $\hat{\vec{L}}^2$ und die einzelnen $\hat{L}_k$ schon.

2 Das Eigenwertproblem

Um das Eigenwertproblem zu lösen, gibt es zwei Strategien: Entweder durch explizite Darstellung der Operatoren in Polarkoordinaten und lösen von DGLs, oder eine Vorgehen wie beim harmonischen Oszillator durch ein algebraisches Verfahren unter Ausnutzen der Kommutatorbeziehungen.

- Definition: Drei hermitesche Operatoren mit

$$[\hat{J}_j, \hat{J}_k] = i\hbar \sum_{l=1}^{3} \varepsilon_{jkl} \hat{J}_l \tag{VI.9}$$

  heißen Drehimpuls (allgemein, nicht nur Bahndrehimpuls).

- Leiteroperatoren:

$$\hat{J}_\pm = \hat{J}_1 \pm i\hat{J}_2 \tag{VI.10}$$

  Die Leiteroperatoren besitzen folgende Eigenschaften:

$$[\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_k] = 0 \tag{VI.11}$$

$$[\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_\pm] = 0 \tag{VI.12}$$

$$[\hat{J}_3, \hat{J}_\pm] = \pm\hbar\hat{J}_\pm \tag{VI.13}$$

$$\hat{J}_+^\dagger = \hat{J}_- \tag{VI.14}$$

$$\hat{\vec{J}}^2 = \hat{J}_+\hat{J}_- + \hat{J}_3^2 - \hbar\hat{J}_3 \tag{VI.15}$$

$$= \hat{J}_-\hat{J}_+ + \hat{J}_3^2 + \hbar\hat{J}_3 \tag{VI.16}$$

  Die Operatoren $\vec{J}^2$, J_3 (ab hier zur Vereinfachung ohne Hut geschrieben) besitzen gemeinsame Eigenfunktionen:

$$\vec{J}^2 \left|jm\right\rangle = \hbar^2 j(j+1) \left|jm\right\rangle \tag{VI.17}$$

$$J_3 \left|jm\right\rangle = \hbar m \left|m\right\rangle \tag{VI.18}$$

- **Satz 1:** Eigenwerte von $\vec{J}^2$ sind ≥ 0.

Beweis: Sei

$$\vec{J}^2 |jm\rangle = \lambda |jm\rangle \tag{VI.19}$$
$$\Rightarrow \lambda = \langle jm|\vec{J}^2|jm\rangle \tag{VI.20}$$
$$= \sum_{i=1}^{3} \langle jm|J_i^2|jm\rangle \tag{VI.21}$$
$$= \sum_{i=1}^{3} \langle J_i jm|J_i jm\rangle = \sum_i \| |J_i jm\rangle \|^2 \geq 0 \tag{VI.22}$$

mit $\lambda = j(j+1)\hbar^2$.

- **Satz 2:**
  Wenn $j(j+1)$ und m Eigenwerte von $\vec{J}^2$ bzw. J_3 sind, dann gilt

$$\Rightarrow -j \leq m \leq j \tag{VI.23}$$

Beweis: Zunächst hat man

$$0 \leq \|\boldsymbol{J}_+ |jm\rangle \|^2 = \langle J_+ \, jm|J_+ \, jm\rangle \tag{VI.24}$$
$$= \langle j,m|J_- J_+|jm\rangle \tag{VI.25}$$
$$= \hbar^2[j(j+1) - m(m+1)] \tag{VI.26}$$
$$= \hbar^2(j-m)(j+m+1) \tag{VI.27}$$

Analog dazu findet man

$$0 \leq \|J_- |jm\rangle \|^2 \tag{VI.28}$$
$$= \dots \tag{VI.29}$$
$$= \hbar^2[j(j+1) - m(m-1)] \tag{VI.30}$$
$$= \hbar^2(j-m+1)(j+m) \tag{VI.31}$$

Nun haben wir damit für J_+:
Fall a):
$j - m \geq 0$ und $j + m + 1 \geq 0$, d.h. $j \geq m$ und $j \geq -m-1$ und damit: $-(j+1) \leq m \leq j$
Fall b):
$j - m \leq 0$ und $j + m + 1 \leq 0$, d.h. $0 \leq j \leq m$ und $0 \leq j \leq -m-1$. Dies ist ein Widerspruch! D.h. nur Fall a) bleibt.

Analog folgt aus Gleichung VI.31 für J_-: $-j \leq m \leq j+1$.

$$\Rightarrow \text{ zusammen genommen } -(j+1) \leq m \leq j \tag{VI.32}$$
$$-j \leq m \leq j+1 \tag{VI.33}$$

und somit

$$-j \leq m \leq j\,. \tag{VI.34}$$

- **Satz 3:**
  Sei $|jm\rangle$ ein Eigenvektor zu $\vec{J}^2$ und J_3 mit Eigenwerten $j(j+1)$ bzw. m, dann gilt:

$$1.)\quad \text{Falls } m = -j, \text{ ist } J_- |jm\rangle = 0 \tag{VI.35}$$
$$2.)\quad \text{Falls } m > -j, \text{ dann ist } J_3[J_- |jm\rangle] = \hbar(m-1)[J_- |jm\rangle]\,. \tag{VI.36}$$

Beweis:

$$1.)\ \|\,|J_-\, jm\rangle\,\|^2 = \hbar^2[j(j+1) - m^2 + m] \tag{VI.37}$$
$$= \hbar^2[j-m+1][j+m] \tag{VI.38}$$
$$\Rightarrow \text{ falls } m = -j \quad \Rightarrow \quad J_- |jm\rangle = 0\ \checkmark \tag{VI.39}$$
$$2.)\ J_3[J_- |jm\rangle] = J_- J_3 |jm\rangle + [J_3, J_-] |jm\rangle \tag{VI.40}$$
$$= \hbar m J_- |jm\rangle - \hbar J_- |jm\rangle = \hbar(m-1) J_- |jm\rangle \tag{VI.41}$$
$$\tag{VI.42}$$

Das heißt: $J_- |jm\rangle$ ist Eigenvektor zu J_3 mit Eigenwert $m-1$.

- **Satz 4:**
  Ähnlich wie Satz 3, aber für J_+, d.h.

$$1.)\quad \text{falls } m = +j \Rightarrow J_+ |jm\rangle = 0 \tag{VI.43}$$
$$2.)\quad \text{falls } m < j \Rightarrow J_3[J_+ |jm\rangle] = \hbar(m+1)[J_+ |jm\rangle] \tag{VI.44}$$

Beweis

$$1.)\quad 0 \leq \|\,|J_+\, jm\rangle\,\|^2 \tag{VI.45}$$
$$= \hbar^2(j-m)(j+m+1) \quad \checkmark \tag{VI.46}$$
$$2.)\quad J_3[J_+ |jm\rangle] = J_+ J_3 |jm\rangle + [J_3, J_+] |jm\rangle \tag{VI.47}$$
$$= \hbar m J_3 |jm\rangle + \hbar J_+ |jm\rangle \tag{VI.48}$$
$$= \hbar(m+1) J_+ |jm\rangle \tag{VI.49}$$

Aus 3 und 4 folgt

$$J_- \left|jm\right\rangle \propto \hbar \left|j, m-1\right\rangle ; \quad m > -j \tag{VI.50}$$

$$J_+ \left|jm\right\rangle \propto \hbar \left|j, m+1\right\rangle ; \quad m < j \tag{VI.51}$$

- Spektrum von $\vec{J}^2$ und J_3
  Betrachte die Folge von Vektoren

$$\left|jm\right\rangle, J_- \left|jm\right\rangle, \dots, (J_-)^p \left|jm\right\rangle, \tag{VI.52}$$

(Eigenvektoren von J_3) mit Eigenwerten

$$\hbar \times |m, m-1, \dots, m-p \quad (p = 0, 1, 2, \dots) \tag{VI.53}$$

mit (Satz 2)

$$-j \leq m-p, m-p+1, \dots, m-1, m \leq j. \tag{VI.54}$$

Satz 3 garantiert, dass alle $\left|jm\right\rangle \neq 0$. Das größte erlaubte $p \equiv \tilde{p}$ sodass $(J_-)^p \left|jm\right\rangle \neq 0$, erfüllt

$$-j \leq m - \tilde{p} \leq -j + 1. \tag{VI.55}$$

Es kann nun aber nicht sein, dass $-j < m - \tilde{p}$, denn sonst würde entsprechend Satz 3 ein $(J_-)^{\tilde{p}+1} \left|jm\right\rangle \neq 0$ existieren, mit $m - \tilde{p} - 1 < -j$. Um diesen Widerspruch aufzuheben, muss

$$-j = m - \tilde{p} \quad (\tilde{p} = 0, 1, 2, \dots) \tag{VI.56}$$

sein. Analoge Argumente mit J_+ führen zu

$$j = m + \tilde{q} \quad (\tilde{q} = 0, 1, 2, \quad) \tag{VI.57}$$

und somit gilt

$$2j = \tilde{q} + \tilde{p} \tag{VI.58}$$

j ist halbzahlig bzw. ein Vielfaches davon!

- Fassen wir die bisherigen Erkenntnisse zusammen:
  Die möglichen Werte von j sind

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots \tag{VI.59}$$

Für festes j sind die möglichen Werte von m die $2j+1$ Zahlen

$$m = -j, -j+1, \ldots, j-1, j \tag{VI.60}$$

Für ein festes j, m ist dann (siehe Satz 2)

$$J_+ |jm\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\, |j, m+1\rangle \tag{VI.61}$$
$$J_- |jm\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\, |j, m-1\rangle \tag{VI.62}$$

mit $J_+ |j, j\rangle = 0,\ J_- |j, -j\rangle = 0$

$$\Rightarrow \| \langle j, m+1| \| = 1 \tag{VI.63}$$
$$\Rightarrow \| \langle j, m-1| \| = 1 \tag{VI.64}$$

- Matrixdarstellung von $\hat{J}_3$ etc.
  Der Unterraum R_j für festes j wird aufgespannt durch die Basisvektoren $\{|j, m\rangle\},\ -j < m < j$. Damit hat man für ein beliebiges $|\Psi\rangle \in R_j$ und festes j

$$|\Psi\rangle = \sum_m c_m |j, m\rangle \tag{VI.65}$$
$$J_3 |\Psi\rangle = \sum_m c_m \hbar m\ |j, m\rangle \tag{VI.66}$$
$$J_\pm |\Psi\rangle = \sum_m \hbar c_m \sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)}\, |jm \pm 1\rangle\,. \tag{VI.67}$$

In diesen Unterräumen hat man Matrixdarstellungen bzgl. $\{|j, m\rangle\}_{-j\leq m\leq j}$

$$j = 0 \Rightarrow m = 0 \Rightarrow J_\alpha^{(0)} = 0, \quad \alpha = 3, +, - \tag{VI.68}$$
$$j = \frac{1}{2} \Rightarrow m = -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \Rightarrow \text{Basis: } \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle, \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle \tag{VI.69}$$
$$\Rightarrow \left\langle \frac{1}{2} m \middle| J_\alpha^{(1/2)} \middle| \frac{1}{2} m' \right\rangle : \tag{VI.70}$$

In Matrixschreibweise:

$$J_3^{(1/2)} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{VI.71}$$

$$J_+^{(1/2)} = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{VI.72}$$

$$J_-^{(1/2)} = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{VI.73}$$

$$\Rightarrow J_1^{(1/2)} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{VI.74}$$

$$\Rightarrow J_2^{(1/2)} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \tag{VI.75}$$

Hier, wichtige Beziehung zu Kapitel 3 (Pauli Matrizen). Hieraus folgt die Darstellung für Spin-$\frac{1}{2}$! Mit

$$j = 1 \Rightarrow m = -1, 0, 1 \quad \Rightarrow |1,-1\rangle, |1,0\rangle, |1,1\rangle \tag{VI.76}$$

folgt

$$J_3^{(1)} = \hbar\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{VI.77}$$

$$J_+^{(1)} = \hbar\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{VI.78}$$

$$J_-^{(1)} = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{0} & 0 \end{pmatrix} \tag{VI.79}$$

$$\Rightarrow J_1^{(1)} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{VI.80}$$

$$\Rightarrow J_2^{(1)} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \tag{VI.81}$$

3 Bahndrehimpuls

Welche Werte die Quantenzahl tatsächlich annehmen kann, hängt von der „Realisierung “der Drehgruppe ab. „Realisierungen “im $\mathbb{R}^3$ beschreiben Rotationen im Raum, parametrisiert durch Winkel θ, φ und dargestellt durch orthogonale Drehmatrizen $(3 \times 3) \rightarrow j$ ganzzahlig

Es sind aber auch Realisierungen zu halbzahligen j möglich $\rightarrow SU(2)$: Spin$-1/2$.

- Nun Bahndrehimpuls: Gehe über zu Kugelkoordinaten

$$x = r\sin(\theta)\cos(\varphi) \tag{VI.82}$$
$$y = r\sin(\theta)\sin(\varphi) \tag{VI.83}$$
$$z = r\cos(\theta). \tag{VI.84}$$

Es folgt

$$L_3 = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi} \tag{VI.85}$$
$$L_\pm = \hbar\, e^{\pm i\varphi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\theta} + i\,\cot(\theta)\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \tag{VI.86}$$
$$\vec{L}^2 = \hbar^2\Big(-\frac{1}{\sin(\theta)}\frac{\partial}{\partial\theta}\Big[\sin(\theta)\frac{\partial}{\partial\theta}\Big] - \frac{1}{\sin^2(\theta)}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\Big) \tag{VI.87}$$

Die Eigenfunktionen sind

$$\langle r,\theta,\varphi|k,j,m\rangle = \Psi_{kjm}(r,\theta,\varphi) \tag{VI.88}$$

mit

$$\vec{L}^2\ \Psi_{kjm}(r,\theta,\varphi) = \hbar^2\ l(l+1)\ \Psi_{kjm}(r,\theta,\varphi) \tag{VI.89}$$
$$L_3\ \Psi_{kjm}(r,\theta,\varphi) = \hbar\ m\ \Psi_{kjm}(r,\theta,\varphi) \tag{VI.90}$$

Da r-abhängige Operatoren nicht in den Drehimpulsoperatoren vorkommen, lässt sich mit einem Separationsansatz schreiben

$$\Psi_{kjm}(r,\theta,\varphi) = R(r)\cdot Y_{lm}(\theta,\varphi) \quad \in L^2(\mathbb{R}^3) \tag{VI.91}$$

Bemerkung:
$\vec{L}^2$ und L_3 bilden keinen vollständigen Satz kommutierender Observablen, die $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ bilden aber einen vollständigen Satz für Funktionen, die auf einer Kugeloberfläche „leben “.
Aufgrund der Symmetrie $Y_{lm}(\theta,\varphi+2\pi) = Y_{lm}(\theta,\varphi)$ folgt aus

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}\,Y_{lm}(\theta,\varphi) = \hbar m\ Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{VI.92}$$
$$\text{d.h. } Y_{lm}(\theta,\varphi) = F_{lm}(\theta)\ e^{im\varphi}, \tag{VI.93}$$

dass m und l ganzzahlig sind. (Die $SU(2)$ Darstellung hat eine 4π-Symmetrie gegenüber Drehungen). Die noch unbestimmten Funktionen $F_{lm}(\theta)$ stellen sich heraus als proportional zu den sog. Legendre-Polynomen $P_{lm}(\theta)$ (siehe weiter unten).

$$l = 0, 1, 2, 3 \ldots \quad ; \quad m = -l, -l+1, \ldots, l-1, l \tag{VI.94}$$

$$Y_{00}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad ; \int \mathrm{d}\Omega \; Y_{00}(\theta, \varphi)^2 = 1 \tag{VI.95}$$

$$Y_{1\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin(\theta) \; e^{\pm i\varphi} \tag{VI.96}$$

$$Y_{10}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos(\theta) \tag{VI.97}$$

Eigenschaften der Kugelflächenfunktionen

- Es gilt

$$\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \; \sin(\theta) \; Y_{l'm'}(\theta, \varphi)^* \cdot Y_{lm}(\theta, \varphi) = \delta_{l'l} \delta_{m,m'} \tag{VI.98}$$

- Außerdem gilt für $\vec{r} \to -\vec{r}$, d.h.

$$\theta \to \pi - \theta, \varphi \to \varphi + \pi, \tag{VI.99}$$

  dass

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^l \; Y_{lm}(\pi - \theta, \pi + \varphi) \text{ , d.h. } \quad \text{Parität } (-1)^l \tag{VI.100}$$

- Unschärferelation:

$$\Delta L_1 \cdot \Delta L_2 \geq \frac{\hbar}{2} |\langle L_3 \rangle| \tag{VI.101}$$

$$\text{Streuung: } (\Delta L_1)_{lm} = (\Delta L_2)_{lm} = \hbar \sqrt{\frac{1}{2}[(l+1)l - m^2]} \tag{VI.102}$$

$$\text{Messwert: } \langle L_3 \rangle_{lm} = \hbar \; m \quad \langle \hat{\vec{L}}^2 \rangle_{lm} = \hbar^2 l(l+1) \tag{VI.103}$$

- Standardbasis im $L^2(\mathbb{R}^3)$
  Mit $\Psi(\vec{x}) \in L^2(\mathbb{R}^3)$ und $\Psi_{klm}(\vec{x}) = R_{klm}(r) \; Y_{lm}(\theta, \varphi)$ kann man

$$\Psi(\vec{x}) = \sum_k \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} c_{klm} \Psi_{klm}(r) \; Y_{lm}(\theta, \varphi) \tag{VI.104}$$

  entwickeln. Die Funktionen $R_{klm}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$ bilden für ein festes $R_{klm}(r)$ einen Unterraum von $L^2(\mathbb{R}^3) = \sum_{l=0}^{\infty} \bigoplus R_l$ mit Dimension $(2l+1)$.