Beziehung Drehimpuls $\longleftrightarrow$ Rotationsgruppe

$\hat{L}_z$ in Kugelkoordinaten:

$$\begin{cases} x = r\sin\theta\cos\varphi \\ y = r\sin\theta\sin\varphi \\ z = r\cos\theta \end{cases}$$

Es gilt:

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} = -i\hbar\left(\frac{\partial x}{\partial\varphi}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial\varphi}\frac{\partial}{\partial y} + \cancel{\frac{\partial z}{\partial\varphi}\frac{\partial}{\partial z}}\right)$$

$$= -i\hbar\left(r\sin\theta(-\sin\varphi)\frac{\partial}{\partial x} + r\sin\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial y}\right)$$

$$= -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

$$= \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$$

$$= \hat{L}_z$$

$$\boxed{\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}}$$

Rotation um z-Axe:

$$(r,\varphi,\theta) \longrightarrow (r,\varphi+\alpha,\theta)$$

$$\rightsquigarrow \psi(r,\varphi,\theta) \longrightarrow \psi(r,\varphi+\alpha,\theta)$$

Falls α infinitesimal:

$$f(r,\varphi+\alpha,\theta) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial\varphi^n} f(r,\varphi,\theta)$$

$$= e^{-i\alpha\hat{L}_z/\hbar} f(r,\varphi,\theta)$$

$\rightsquigarrow$ cf. Beziehung Translationsoperator $\longleftrightarrow$ Impulsoperator

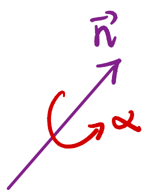
- $\hat{\vec{P}}$ ist der Erzeuger der infinitesimalen Translationen:

$$\hat{T}(\vec{\alpha}) = e^{-i\vec{\alpha}\cdot\hat{\vec{P}}/\hbar}$$

- $\hat{H}$ ist der Erzeuger der infinitesimalen Zeittranslationen

$$\hat{U}(t) = e^{-it\hat{H}/\hbar}$$

- $\hat{\vec{L}}$ ist der Erzeuger der infinitesimalen Rotationen



$$\hat{R}(\alpha,\vec{n}) = e^{-i\alpha\vec{n}\cdot\hat{\vec{L}}/\hbar}$$

mit $\|\vec{n}\| = 1$, und $\hat{R}(\alpha,\vec{n})$ ist eine Rotation mit Winkel α um die Axe $\vec{n}$.

Sei $f(r,\varphi,\theta)$ eine Eigenfunktion mit

$$\hat{L}_z f = m\hbar f$$

$$\hat{L}^2 f = \ell(\ell+1)\hbar^2 f$$

$$\rightsquigarrow R_z(\alpha) f = e^{-i\alpha \hat{L}_z/\hbar} f = e^{-im\alpha} f$$

Rotation um z-Axe

Aber: $R_z(2\pi) f = f \Rightarrow e^{-2\pi i m} f = f$

$$\Rightarrow e^{-2\pi i m} = 1$$

$$\Rightarrow m \in \mathbb{Z}$$

$\Rightarrow$ Für Rotationen im Raum kann $\hat{L}_z/\hbar$ nur ganzzahlige Eigenwerte haben: $m \in \mathbb{Z}$

Eigenfunktionen des Drehimpulsoperators

In der Positions-Basis (Kugelkoordinaten!)

$$\langle \vec{x} | l, m \rangle = f_{lm}(r, \theta, \varphi)$$

$$\langle \vec{x} | \hat{L}_z | l, m \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} f_{lm}(r, \theta, \varphi)$$

$$= \hbar m \, f_{lm}(r, \theta, \varphi)$$

$$\Rightarrow \quad f_{lm}(r, \theta, \varphi) = e^{im\varphi} A_{lm}(r, \theta)$$

Frage: 1) Was ist die Darstellung von $\hat{\vec{L}}^2$ in der Positions-Basis?

2) Was sind die $f_{lm}(r, \theta, \varphi)$ oder $A_{lm}(r, \theta)$?

Es gilt: [Hausaufgabe!]

$$\hat{\vec{L}}^2 = \hat{\vec{x}}^2 \hat{\vec{p}}^2 - (\hat{\vec{x}} \cdot \hat{\vec{p}})^2 + i\hbar \, \hat{\vec{x}} \cdot \hat{\vec{p}}$$

In der Positions-Basis:

$$\hat{\vec{x}} \cdot \hat{\vec{p}} = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial x} + y \frac{\partial}{\partial y} + z \frac{\partial}{\partial z} \right) = -i\hbar \, r \frac{\partial}{\partial r}$$

da

$$r \frac{\partial}{\partial r} = \underbrace{r \frac{\partial x}{\partial r}}_{=x} \frac{\partial}{\partial x} + \underbrace{r \frac{\partial y}{\partial r}}_{=y} \frac{\partial}{\partial y} + \underbrace{r \frac{\partial z}{\partial r}}_{=z} \frac{\partial}{\partial z}$$

$$\Rightarrow (\hat{\vec{x}}\cdot\hat{\vec{p}})^2 \psi = -\hbar^2 r \frac{\partial}{\partial r}\left(r \frac{\partial}{\partial r}\psi\right)$$

$$= \left(-\hbar^2 r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} - r\frac{\partial}{\partial r}\right)\psi$$

$$\Rightarrow \hat{\vec{L}}^2 = r^2\left(-\hbar^2 \vec{\nabla}^2\right) + \hbar^2 r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} + 2\hbar^2 r \frac{\partial}{\partial r}$$

$$\Rightarrow \vec{\nabla}^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2}\frac{\hat{\vec{L}}^2}{\hbar^2}$$

Aber: $\Delta = \vec{\nabla}^2$ ist der Laplace-Operator.

In Kugelkoordinaten:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\Delta_{\theta,\varphi}$$

mit

$$\Delta_{\theta,\varphi} = \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

$\Rightarrow$ In der Positions-Basis ist $\hat{\vec{L}}^2$ der Winkelanteil des Laplace-Operators in Kugelkoordinaten:

$$\boxed{\hat{\vec{L}}^2 \underset{\substack{\text{Positions}\\ \text{-Basis}}}{=} -\hbar^2 \Delta_{\theta,\varphi}}$$

Konsequenz: Eigenfunktionen von $\hat{\vec{L}}^2$ sind Eigenfunktionen von $\Delta_{\theta,\varphi}$:

$$\hat{\vec{L}}^2 f_{\ell m} = \ell(\ell+1)\hbar^2 f_{\ell m} \Leftrightarrow \Delta_{\theta,\varphi} f_{\ell m} = -\ell(\ell+1) f_{\ell m}$$

In anderen Worten, wir suchen Funktionen $f_{\ell m}(\theta,\varphi)$ (kein r!) so dass:

$$\Delta_{\theta,\varphi} f_{\ell m}(\theta,\varphi) = -\ell(\ell+1) f_{\ell m}(\theta,\varphi)$$

$f_{\ell m}(\theta,\varphi)$ ist quadrat-integrabel:

$$\int_{S^2} d\Omega_2 \, |f_{\ell m}(\theta,\varphi)|^2 < \infty$$

wobei $d\Omega_2$ das Integrationsmass auf der Kugel S^2 ist:

$$d\Omega_2 = d\varphi \, d\cos\theta = \sin\theta \, d\varphi \, d\theta$$

Da $\hat{\vec{L}}^2$ hermitisch ist, muss es eine ONB aus Eigenfunktionen geben

$\rightsquigarrow$ Kugelflächenfunktionen $Y_\ell^m(\theta,\varphi)$

mit

$$\int_{S^2} d\Omega_2 \; Y_\ell^m(\theta,\varphi)\; Y_{\ell'}^{m'}(\theta,\varphi) = \delta_{\ell\ell'}\, \delta_{mm'}$$

oder anders:

> Die Kugelflächen funtionen $Y_\ell^m(\theta,\varphi)$ sind eine ONB von $L^2(S^2, d\Omega_2)$.

Explizite Formel für $Y_\ell^m(\theta,\varphi)$:

- $m \geq 0$

$$Y_\ell^m(\theta,\varphi) = \left[\frac{2\ell+1}{4\pi}\,\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}\right]^{1/2} P_\ell^{|m|}(\cos\theta)\, e^{i|m|\varphi}$$

- $m < 0$

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

wobei $P_\ell^m(x)$ sind die zugeordneten Legendre Polynome sind

$$P_\ell^m(x) = (-1)^m (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_\ell(x)$$

und $P_\ell(x)$ sind die Legendre Polynome

$$P_\ell(x) = \frac{1}{2^\ell \ell!}\frac{d^\ell}{dx^\ell}(x^2-1)^\ell$$

Eigenschaften

- $\left(\frac{2l+1}{2}\right)^{1/2} P_l(x)$ sind ONB für $L^2([-1,1], dx)$

$$\int_{-1}^{1} dx \; P_l(x) P_{l'}(x) = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}$$

- $P_l(1) = 1 \quad \forall l$
- $P_l(-x) = (-1)^l P_l(x)$
- P_l hat genau l Nullstellen in $[-1,1]$.

Beispiel:

$$P_0(x) = 1, \quad P_1(x) = x, \quad P_2(x) = \frac{3}{2} x^2 - \frac{1}{2}, \ \ldots$$

$$P_0^0(x) = P_0(x) = 1$$

$$P_1^0(x) = P_1(x) = x$$

$$P_1^1(x) = -\sqrt{1-x^2}$$

$$P_2^0(x) = P_2(x) = \frac{3}{2} x^2 - \frac{1}{2}$$

$$P_2^1(x) = -3x\sqrt{1-x^2}$$

$$P_2^2(x) = 3(1-x^2)$$

$$\vdots$$

Beispiele:

$$Y_0^0(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$Y_1^1(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\ \mathrm{sen}\,\theta\ e^{i\varphi}$$

$$Y_1^0(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\ \cos\theta$$

$$Y_1^{-1}(\theta,\varphi) = -Y_1^1(\theta,\varphi)^* = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\ \mathrm{sen}\,\theta\ e^{-i\varphi}$$

$$Y_2^2(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\ \mathrm{sen}^2\theta\ e^{2i\varphi}$$

$$Y_2^1(\theta,\varphi) = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\ \sin\theta\cos\theta\ e^{i\varphi}$$

$$Y_2^0(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}\left(3\cos^2\theta - 1\right)$$

$$Y_2^{-1}(\theta,\varphi) = -Y_2^1(\theta,\varphi)^* = \sqrt{\frac{15}{8\pi}}\ \sin\theta\cos\theta\ e^{-i\varphi}$$

$$Y_2^{-2}(\theta,\varphi) = +Y_2^2(\theta,\varphi)^* = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\ \mathrm{sen}^2\theta\ e^{-2i\varphi}$$

Parität:

Wir wissen: $\hat{\mathcal{P}}\,\hat{\vec{x}}\,\hat{\mathcal{P}}^{+} = -\hat{\vec{x}}$

$$\hat{\mathcal{P}}\,\hat{\vec{p}}\,\hat{\mathcal{P}}^{+} = -\hat{\vec{p}}$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\hat{\mathcal{P}}\,\hat{\vec{L}}\,\hat{\mathcal{P}}^{+} = +\hat{\vec{L}}}$$

(Der Drehimpuls ist ein Pseudovektor)

Da $\hat{\mathcal{P}}^{+} = \hat{\mathcal{P}} = \hat{\mathcal{P}}^{-1}$,

$$[\hat{\mathcal{P}}, \hat{\vec{L}}] = 0$$

$\Rightarrow$ Es gibt eine gemeinsame Eigenbasis für $\hat{\mathcal{P}}$ und $\hat{\vec{L}}$.

Parität agiert auf (θ, φ) als

$$(\theta, \varphi) \xrightarrow{\hat{\mathcal{P}}} (\pi - \theta, \varphi + \pi)$$

$$Y_\ell^m(\theta,\varphi) \xrightarrow{\hat{\mathcal{P}}} Y_\ell^m(\pi-\theta, \varphi+\pi)$$

$$\propto P_\ell^{|m|}(\cos(\pi-\theta))\, e^{i|m|(\varphi+\pi)}$$

$$\propto \underbrace{P_\ell^{|m|}(-\cos\theta)}_{=(-1)^{m+\ell} P_\ell^{|m|}(\cos\theta)}\,(-1)^m\, e^{i|m|\varphi}$$

$$\propto (-1)^\ell\, P_\ell^{|m|}(\cos\theta)\, e^{i|m|\varphi}$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{Y_\ell^m(\theta,\varphi) \xrightarrow{\hat{\mathcal{P}}} Y_\ell^m(\pi-\theta,\varphi+\pi) = (-1)^\ell\, Y_\ell^m(\theta,\varphi)}$$

$Y_\ell^m(\theta,\varphi)$ ist simultane ONB für $\hat{\mathcal{P}}$, $\hat{L}_z$ und $\hat{\vec{L}}^2$