8. Drehimpulsoperator und sphärisch symmetrische Potentiale $V(|\vec{r}|)$

- Drehimpulsalgebra und simultane Eigenzustände $V(|\vec{r}|)$ ✓
- Algebraischer Zugang für Eigenzustände
- Explizite Eigenfkten im Ortsraum

(Bahn) Drehimpulsoperator:

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} = \hat{\vec{Q}} \times \hat{\vec{P}}$$

in Ortsdarstellung

$$\hat{\vec{L}} = \frac{\hbar}{i}\, \vec{r} \times \vec{\nabla}$$

$$\hat{L}_j = \frac{\hbar}{i}\, \varepsilon_{jkl}\, r_k \nabla_l$$

$x\,y\,z$

∂_y

$$= \frac{\hbar}{i} \begin{pmatrix} y\partial_z - z\partial_y \\ z\partial_x - x\partial_z \\ x\partial_y - y\partial_x \end{pmatrix}$$

Aus Born-Jordan Vertauschungsrelationen $[\hat{x}, \hat{p}_x] = \frac{\hbar}{i}(x\partial_x - \underbrace{\partial_x x}_{1 + x\partial_x}) = i\hbar$

$\Rightarrow$ Vertauschungsoperatoren für $\hat{\vec{L}}$

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \left[(y\partial_z - z\partial_y)(z\partial_x - x\partial_z) - (z\partial_x - x\partial_z)(y\partial_z - z\partial_y)\right]$$

$$= \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 [y\partial_x - x\partial_y] = -\frac{\hbar}{i}\hat{L}_z = i\hbar \hat{L}_z$$

$$[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x \quad \text{und} \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y$$

$$\Rightarrow \boxed{[\hat{L}_j, \hat{L}_k] = i\hbar\, \varepsilon_{jkl} \hat{L}_l}$$ Drehimpulsalgebra

$$\equiv \sum_l i\hbar\, \varepsilon_{jkl} \hat{L}_l$$

d.h. alle 3 Komponenten sind nicht sind simultan scharf meßbar

Was ist mit $\hat{\vec{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$? $[\hat{A}^2, \hat{B}] = \hat{A}[\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{A}$

$$[\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_j] = \hat{L}_k \underbrace{[\hat{L}_k, \hat{L}_j]}_{i\hbar\, \varepsilon_{kjl} \hat{L}_l} + [\hat{L}_k, \hat{L}_j]\hat{L}_k = 0$$

$$\Rightarrow \boxed{[\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_j] = 0}$$

$\Rightarrow \exists$ simultane Eigenzustände von $\hat{\vec{L}}^2$ und <u>einer</u> Komponente $\hat{L}_j$

wähle $\hat{L}_j = \hat{L}_z$

Übung (H29):
$$[\hat{L}_j, \hat{r}_k] = i\hbar\, \varepsilon_{jkl} \hat{r}_l$$
$$[\hat{L}_j, \hat{p}_k] = i\hbar\, \varepsilon_{jkl} \hat{p}_l$$

mit $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$

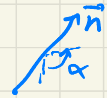
$\Rightarrow [\hat{\vec{L}}, \hat{\vec{r}}^2] = 0 \Rightarrow [\hat{\vec{L}}, \underbrace{\hat{V}(\hat{\vec{r}}^2)}_{V(|\vec{r}|)}] = 0$ für sphärisch sym. V

$\Rightarrow [\hat{\vec{L}}, \hat{\vec{p}}^2] = 0 \Rightarrow [\hat{\vec{L}}, \hat{T}] = 0$

$\Rightarrow$ Für sphärisch sym. Potential $[\hat{\vec{L}}, \hat{H}] = 0$

$\rightarrow$ Drehimpuls ist erhalten für sphärisch sym. Potential

Für $\hat{\vec{L}}$ im Ortsraum kann man zeigen, dass $\hat{\vec{L}}$ Drehungen erzeugt → Generator der Drehgruppe.



Bei Drehung um Achse $\vec{n}$ $(\vec{n}^2 = 1)$ mit Winkel α gilt mit $\vec{\alpha} = \alpha\vec{n}$

$$\underbrace{\psi'(\vec{r})}_{\text{nach Drehung}} = \underbrace{\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{\alpha}\cdot\hat{\vec{L}}\right)}_{\hat{U} = e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\alpha}\cdot\hat{\vec{L}}}} \underbrace{\psi(\vec{r})}_{\text{vor Drehung}}$$

unitäre Trafo für Drehungen

d.h. $[\hat{\vec{L}}, \hat{H}] = 0$ folgt für Rotationsinv. Probleme

→ sphärisch sym. Potential

Bsp.: $\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \alpha \end{pmatrix}$ Drehung um z-Achse

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha\hat{L}_z} = e^{-\cancel{\frac{i}{\hbar}}\alpha\cancel{\frac{\hbar}{i}}(x\partial_y - y\partial_x)}$$

$$[\hat{\vec{L}}, \hat{H}] = 0 \Leftrightarrow \underbrace{\underset{e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\alpha}\hat{\vec{L}}}}{\hat{U}^+}\hat{H}\hat{U}}_{\hat{H}'} = \hat{H} \Leftrightarrow \hat{H}\hat{U} = \hat{U}\hat{H}$$

$$\hat{H}\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{L}}\hat{H}$$

$$\Rightarrow [\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_{j=z}] = 0 = [\hat{L}_{j=z}, \hat{H}]$$

$\Rightarrow$ $\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_z, \hat{H}$ kommensurabel — $V(|\vec{r}|)$

$\exists$ simultane Eigenzustände, mit EW'en von $\underbrace{\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_z}_{\text{Winkelabh.}}, \underset{\text{radial QZ, r-Bew.}}{\hat{H}}$

→ Quantenzahlen zu 3 Op (EW) charakterisieren QM Zustand in 3d

Algebraischer Zugang zu Eigenzuständen $\hat{\vec{L}}^2$ und $\hat{L}_z$

dim. los.

Ansatz: $\hat{\vec{L}}^2 \, |\lambda, \mu\rangle = \lambda \hbar^2 \, |\lambda, \mu\rangle$ $\qquad$ dim von $\hat{L}_j = \hbar$

$\hat{L}_z \, |\lambda, \mu\rangle = \mu \hbar \, |\lambda, \mu\rangle$

$\hat{\vec{L}}^2$ ist posi. def. $\Rightarrow \lambda \geq 0$

Definiere $\boxed{\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i \hat{L}_y}$ $\quad \rightarrow \quad \hat{a}^+, \hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{\tilde{Q}} \mp i \hat{\tilde{P}} \right)$

$\Rightarrow (\hat{L}_+)^+ = \hat{L}_- \quad \rightarrow \quad (\hat{a})^+ = \hat{a}^+$

$\Rightarrow$ (1) $[\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] = \pm \hbar \hat{L}_\pm \quad \rightarrow \quad [\hat{a}^+\hat{a}, \hat{a}^+ / \hat{a}] = \pm \, \hat{a}^+ / \hat{a}$

$\rightarrow$ $\hat{L}_\pm$ sind Leiteroperatoren bzg. $\hat{L}_z$ $\qquad |\lambda \mu\rangle \underset{\hat{L}_-}{\overset{\hat{L}_+}{\rightleftarrows}} |\lambda, \mu+1\rangle$

(2) $[\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_\pm] = 0$ $\rightarrow$ Leitops lassen λ invariant

(3) $[\hat{L}_+, \hat{L}_-] = 2\hbar \hat{L}_z$

$$\Rightarrow \hat{\vec{L}}^2 = \hat{L}_z^2 + \hat{L}_+ \hat{L}_- - \hbar L_z$$
$$= \hat{L}_z^2 + \hat{L}_- \hat{L}_+ + \hbar L_z$$

$$\Rightarrow \langle \lambda \mu | \underbrace{\hat{\vec{L}}^2 - L_z^2}_{L_x^2 + L_y^2} | \lambda \mu \rangle = \langle \lambda \mu | \frac{1}{2} \left(\hat{L}_+ \underset{= (\hat{L}_+)^+}{\hat{L}_-} - \underset{= (\hat{L}_+)^+}{\hat{L}_-} \hat{L}_+ \right) | \lambda \mu \rangle \geq 0$$

Aus (1) $\Rightarrow$ $\hat{L}_z \hat{L}_\pm |\lambda\mu\rangle = \left(\pm\hbar \hat{L}_\pm + \hat{L}_\pm \underbrace{\hat{L}_z}_{\to\, \mu\hbar}\right) |\lambda\mu\rangle$

$$= (\mu \pm 1)\hbar\, \hat{L}_\pm |\lambda\mu\rangle$$

$$\Rightarrow \quad \hat{L}_\pm |\lambda\mu\rangle = C_\pm(\lambda,\mu)\, |\lambda,\mu\pm 1\rangle$$

Bestimme $C_\pm(\lambda,\mu)$ aus Normierung

$$\underbrace{\langle\lambda\mu| \underbrace{(\hat{L}_+)^+}_{\hat{L}_-} \hat{L}_+ |\lambda\mu\rangle}_{(C_+(\lambda,\mu))^2} \overset{(3)}{=} \langle\lambda\mu| \hat{\vec{L}}^2 - \hat{L}_z^2 - \hbar \hat{L}_z |\lambda\mu\rangle$$

$$(C_+(\lambda,\mu))^2 = (\lambda - \mu^2 - \mu)\hbar^2 \geq 0$$

Ebenso

$$\underbrace{\langle\lambda\mu| \underbrace{(\hat{L}_-)^+}_{\hat{L}_+} \hat{L}_- |\lambda\mu\rangle}_{(C_-(\lambda,\mu))^2} = \langle\lambda\mu| \hat{\vec{L}}^2 - \hat{L}_z^2 + \hbar \hat{L}_z |\lambda\mu\rangle$$

$$(C_-(\lambda,\mu))^2 = (\lambda - \mu^2 + \mu)\hbar^2 \geq 0$$

Aus $\lambda - \mu^2 - \mu \geq 0$ und $\lambda - \mu^2 + \mu \geq 0 \Rightarrow \lambda \geq \mu^2$

Zusammen mit $|\lambda\mu\rangle \xrightarrow[(\hat{L}_\pm)^k]{} |\lambda,\mu \pm k\rangle$ $\quad$ k ganzzahlig

folgt dass für festes λ existieren maximales μ_{max} und minimales μ_{min}

mit $\lambda \geq \mu_{max}^2$ und $\lambda \geq \mu_{min}^2$ und

$$\hat{L}_+ |\lambda\, \mu_{max}\rangle = 0 \quad \text{und} \quad \hat{L}_- |\lambda\, \mu_{min}\rangle = 0$$

Leiter muss von beiden Seiten beschränkt sein! $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle$

$$\Rightarrow \quad \lambda - \mu_{max}^2 - \mu_{max} = 0 \; (*) \quad \text{und} \quad \lambda - \mu_{min}^2 + \mu_{min} = 0$$

$$\Rightarrow \quad \mu_{max}^2 + \mu_{max} = \mu_{min}^2 - \mu_{min}$$

quadratische Glg. mit 2 Lösungen: $\boxed{\mu_{min} = -\mu_{max}}$

oder $\cancel{\mu_{min} = \mu_{max} + 1}$ $\quad \mu_{min} \leq \mu_{max}$

da Leiter mit ganzzahligen Schritten: $\mu_{max} = \underset{\overset{\shortparallel}{-\mu_{max}}}{\mu_{min}} + n \quad , n \in \mathbb{N}_0$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\mu_{max} = \frac{n}{2} = -\mu_{min}}$$

μ ist ganz- oder halbzahlig

Definiere $\mu_{max} \equiv \ell$ $\qquad \ell = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$

$$\overset{(*)}{\Rightarrow} \quad \lambda = \ell(\ell+1)$$

d.h. Eigenzustände von $\hat{\vec{L}}^2$ und $\hat{L}_z$:

$$|\lambda, \mu\rangle = |\ell(\ell+1), \mu\rangle \equiv |\ell, \underset{\overset{\shortparallel}{\mu}}{m}\rangle$$

$$\mu = -\ell, -\ell+1, \dots \ell-1, \ell$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\begin{aligned} \hat{\vec{L}}^2 |\ell\, m\rangle &= \ell(\ell+1)\hbar^2\, |\ell m\rangle \\ \hat{L}_z |\ell\, m\rangle &= m\hbar\, |\ell m\rangle \end{aligned}}$$

ℓ: Drehimpulsquantenzahl

m: magnetische Quantenzahl

für jedes $\ell = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$ gibt es $2\ell+1$ m-Zustände $-\ell, \dots, +\ell$

und $\hat{L}_\pm |l m\rangle = \underbrace{\sqrt{l(l+1) - m(m\pm1)}\,\hbar}_{C_+(\lambda\mu)}\,|l, m\pm1\rangle$

$$\left(\begin{matrix}\hat{a}^+ \\ \hat{a}\end{matrix}\ |n\rangle = \sqrt{\cdots}\ |n\pm1\rangle \right)$$

$l=0 \qquad |0,0\rangle$

$$l=2 \qquad 0 \xleftarrow{\hat{L}_-} \overset{\mu_{min}}{|2,-2\rangle} \xleftarrow{\hat{L}_-} |2,-1\rangle \xleftarrow{\hat{L}_-} |2,0\rangle \xrightarrow{\hat{L}_+} |2,1\rangle \longrightarrow \overset{\mu_{max}}{|2,2\rangle} \longrightarrow 0$$

$$\hat{L}_+ |l,l\rangle = 0$$

$$\vdots$$

$$\langle \theta,\varphi | l m\rangle = Y_{lm}(\theta,\varphi)$$