

(261)	$\frac{d}{dt} \langle \vec{r} \rangle = \frac{1}{m} \langle \vec{p} \rangle$	stetig exakt
(262)	$\frac{d}{dt} \langle \vec{p} \rangle \approx F(\langle \vec{r} \rangle)$	<u>klass.</u> <u>Näherung</u>

Bem: Falls $F'(\langle x \rangle) = 0$ ist klass. Näherung exakt, d.h. z.B. für harmonischen Oszillator gelten Gl. (261) + (262) exakt

V. Der Drehimpuls in der Quantenmechanik

5.1 Elementare Eigenschaften des Drehimpulsoperators

Aus der klassischen Mechanik wissen wir

$$(263) \quad \vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = \epsilon_{ijk} x_j p_k \vec{e}_i$$

In der Q. Mechanik sind $\hat{\vec{r}}$ und $\hat{\vec{p}}$ nicht kommutierende Operatoren

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij}$$

Da $\vec{L}$ aus $\hat{x}_i$ und $\hat{p}_j$ mit $i \neq j$ enthält ist keine Symmetrisierung oder andere Festlegung der Operatorordnung notwendig, d.h.

$$(264) \quad \begin{aligned} \hat{L}_i &= \varepsilon_{ijk} \hat{x}_j \hat{p}_k = \varepsilon_{ijk} \hat{p}_k \hat{x}_j \\ \vec{\hat{L}} &= \vec{r} \times \vec{p} \end{aligned}$$

$$(265) \quad \hat{L}_x = \hat{y} \hat{p}_z - \hat{z} \hat{p}_y \quad \hat{L}_y = \hat{z} \hat{p}_x - \hat{x} \hat{p}_z \quad \hat{L}_z = \hat{x} \hat{p}_y - \hat{y} \hat{p}_x$$

Ortdarstellung

(266)

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

elementare Vertauschungsregeln

$$(267) \quad \begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= [\hat{y} \hat{p}_z - \hat{z} \hat{p}_y, \hat{z} \hat{p}_x - \hat{x} \hat{p}_z] \\ &= -i\hbar \hat{y} \hat{p}_x + i\hbar \hat{p}_y \hat{x} = i\hbar \hat{L}_z \end{aligned}$$

analog findet man

(269)

zyklisch ↙

(268)

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= i\hbar \hat{L}_z \\ [\hat{L}_y, \hat{L}_z] &= i\hbar \hat{L}_x \\ [\hat{L}_z, \hat{L}_x] &= i\hbar \hat{L}_y \end{aligned}$$

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{L}_k$$

Drehimpulsvertauschung

$$\hat{\vec{L}} = \hat{L}_x \vec{e}_x + \hat{L}_y \vec{e}_y + \hat{L}_z \vec{e}_z$$

$$\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{L}} = \hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = \sum_{j=1}^3 \hat{L}_j^2 = \hat{L}_j \hat{L}_j$$

(270) Summenkonvention

Es gilt:

$$\begin{aligned} [\hat{L}_j, \hat{L}^2] &= [\hat{L}_j, \hat{L}_n \hat{L}_n] = [\hat{L}_j, \hat{L}_n] \hat{L}_n \\ &\quad + \hat{L}_n [\hat{L}_j, \hat{L}_n] \\ &= i \varepsilon_{jnk} \hat{L}_k \hat{L}_n + i \varepsilon_{jnk} \hat{L}_n \hat{L}_k \\ &= i \varepsilon_{jnk} (\hat{L}_k \hat{L}_n + \hat{L}_n \hat{L}_k) = 0 \end{aligned}$$

antisymmetrisch symmetrisch ↑

$$(271) \quad \boxed{[\hat{L}_j, \hat{L}^2] = 0}$$

Alle Komponenten des Drehimpulses kommutieren mit dem Betragsquadrat!

⇒ | $\exists$ eine gemeinsame Basis von Eigenzuständen einer Komponente (z.B. $\hat{L}_z$) und dem Betragsquadrat des Drehimpulses!

allgemeine Unschärferelation

$$(272) \quad \langle \Delta \hat{L}_x^2 \rangle \langle \Delta \hat{L}_y^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} |\langle \hat{L}_z \rangle|^2 \quad \text{etc.}$$

D.h. außer in Zuständen mit $\langle \hat{L}_z \rangle = 0$ sind $\hat{L}_x$ und $\hat{L}_y$ nicht gleichzeitig meßbar

5.2 Spektrum der Drehimpulsoperatoren

$$\text{Da z.B. } [\hat{L}_z, \hat{L}^2] = 0$$

$\Rightarrow \exists$ gemeinsamer Satz von EZ

Nun wollen wir diesen Satz von Zuständen und die dazugehörigen Eigenwerte finden.

Dazu definieren wir Leiternoperatoren

$$(273) \quad \boxed{\hat{L}_{\pm} = \hat{L}_x \pm i \hat{L}_y} \quad \hat{L}_+^\dagger = \hat{L}_-$$

Vertauschungsregeln:

$$\begin{aligned} [\hat{L}_z, \hat{L}_+] &= [\hat{L}_z, \hat{L}_x + i \hat{L}_y] = i\hbar(\hat{L}_y - i \hat{L}_x) \\ &= \hbar(\hat{L}_x + i \hat{L}_y) = \hbar \hat{L}_+ \end{aligned}$$

$\Rightarrow$
(274)

$$\begin{aligned} [\hat{L}_z, \hat{L}_+] &= \hbar \hat{L}_+ \\ [\hat{L}_z, \hat{L}_-] &= -\hbar \hat{L}_- \end{aligned}$$

Außerdem gilt natürlich

(275) $[\hat{L}^2, \hat{L}_\pm] = [\hat{L}^2, \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y] = 0$

Mit Hilfe dieser Leiteroperatoren können wir nun das Spektrum von $\hat{L}_z$ und $\hat{L}^2$ bestimmen:

Spektrum von $\hat{L}_z$

(276) $\hat{L}_z |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle$ $m = ?$
 $|l, m\rangle = ?$

$\hbar$ hier aus Dimensionsgrößen $[L_z] = [\hbar]$

Betrachten wir nun den Zustand $\hat{L}_+ |l, m\rangle$

$$\begin{aligned} \hat{L}_z \hat{L}_+ |l, m\rangle &= \hat{L}_+ \hat{L}_z |l, m\rangle + \hbar \hat{L}_+ |l, m\rangle \\ &\quad \uparrow \\ &\quad (274) \\ &= \hbar(m+1) \hat{L}_+ |l, m\rangle \end{aligned}$$

D.h.

(277)

$$\begin{aligned} \hat{L}_+ |l, m\rangle &\sim |l, m+1\rangle \\ \hat{L}_- |l, m\rangle &\sim |l, m-1\rangle \end{aligned}$$

Aufsteigeoperator

Absteigeoperator

Spektrum von $\hat{L}^2$

Da $[\hat{L}_z, \hat{L}^2] = 0 \Rightarrow$ gemeinsame EZ

$$|\psi_m\rangle = |\psi_{m,k}\rangle \quad k - \text{Eigenwert von } \hat{L}^2$$

(278) mit $\hat{L}^2 |\psi_{m,k}\rangle = \hbar^2 k^2 |\psi_{m,k}\rangle \quad k^2 = ?$

$\hbar^2$ wieder aus Dimensionsgründen $[\hat{L}^2] = [\hbar^2]$

$$\hat{L}^2 \hat{L}_{\pm} |\psi_{m,k}\rangle = \hat{L}_{\pm} \hat{L}^2 |\psi_{m,k}\rangle = \hbar^2 k^2 \hat{L}_{\pm} |\psi_{m,k}\rangle$$

$\Rightarrow$ Alle Eigenzustände $|\psi_{m,k}\rangle$ mit $m, m \pm 1, m \pm 2, \dots$ haben denselben Eigenwert k^2 zu $\hat{L}^2$

• Nun gilt:

$$\langle \psi_{k,m} | \hat{L}^2 | \psi_{k,m} \rangle = \langle \hat{L}_x^2 \rangle + \langle \hat{L}_y^2 \rangle + \underbrace{\langle \hat{L}_z^2 \rangle}_{= \hbar^2 m^2}$$

$$(279) \quad \hbar^2 k^2 = \underbrace{\langle \hat{L}_x^2 \rangle}_{\geq 0} + \underbrace{\langle \hat{L}_y^2 \rangle}_{\geq 0} + \hbar^2 m^2$$

D.h. für einen gegebenen Eigenwert k^2 gibt es einen minimalen und einen maximalen Wert von m

$$(280) \quad -k \leq m \leq k$$

D.h. es muß gelten

$$(281) \quad \hat{L}_- |\psi_{\kappa, m_{\min}}\rangle = \hat{L}_+ |\psi_{\kappa, m_{\max}}\rangle = 0$$

← 25.25

• Desweiteren gilt

$$\begin{aligned} \hat{L}_+ \hat{L}_- &= (\hat{L}_x + i \hat{L}_y)(\hat{L}_x - i \hat{L}_y) \\ &= \underbrace{\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2} + i(\underbrace{\hat{L}_y \hat{L}_x - \hat{L}_x \hat{L}_y}_{-[\hat{L}_x, \hat{L}_y]}) \\ &= \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 \\ &= \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 + \hbar \hat{L}_z \end{aligned}$$

analog

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

d.h.

(282)

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 &= \hat{L}_- \hat{L}_+ + \hat{L}_z^2 + \hbar \hat{L}_z \\ &= \hat{L}_+ \hat{L}_- + \hat{L}_z^2 - \hbar \hat{L}_z \end{aligned}$$

Nun wollen wir sehen was $\hat{L}^2$ angewendet auf $|\psi_{\kappa, m_{\min}}\rangle$ und $|\psi_{\kappa, m_{\max}}\rangle$ liefert

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 |\psi_{\kappa, m_{\min}}\rangle &= (\underbrace{\hat{L}_+ \hat{L}_-}_{=0} + \hat{L}_z^2 - \hbar \hat{L}_z) |\psi_{\kappa, m_{\min}}\rangle \\ &= \hbar^2 (m_{\min}^2 - m_{\min}) |\psi_{\kappa, m_{\min}}\rangle = \hbar^2 \kappa^2 |\psi_{\kappa, m_{\min}}\rangle \end{aligned}$$

Analog finden wir mit der anderen Gl. aus (282)

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 |2\rangle_{k, m_{\max}} &= (\hat{L}_- \hat{L}_+ + \hat{L}_z^2 + \hbar \hat{L}_z) |2\rangle_{k, m_{\max}} \\ &= \hbar^2 (m_{\max}^2 + m_{\max}) |2\rangle_{k, m_{\max}} = \hbar^2 k^2 |2\rangle_{k, m_{\max}} \end{aligned}$$

D.h.

$$k^2 = m_{\min}^2 - m_{\min} = m_{\max}^2 + m_{\max}$$

$$(283) \quad \Rightarrow \quad \underline{\underline{m_{\max} = -m_{\min}}}$$

Nun sei $m_{\max} = \ell$ d.h. $k^2 = \ell(\ell+1)$

$$(284) \quad \boxed{\begin{aligned} \hat{L}^2 |2\rangle_{\ell, m} &= \hbar^2 \ell(\ell+1) |2\rangle_{\ell, m} \\ \hat{L}_z |2\rangle_{\ell, m} &= \hbar m |2\rangle_{\ell, m} \quad -\ell \leq m \leq \ell \end{aligned}}$$

Aber: Wir wissen noch nicht welche Werte m und ℓ annehmen!

$$\hat{L}_{\pm} |2\rangle_{\ell, m} = \alpha_{\ell, m}^{\pm} |2\rangle_{\ell, m \pm 1}$$

$$\| \hat{L}_{\pm} |2\rangle_{\ell, m} \|^2 = \langle 2\rangle_{\ell, m} | \hat{L}_{\mp} \hat{L}_{\pm} |2\rangle_{\ell, m} \rangle$$

$$= \langle 2\rangle_{\ell, m} | \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 \mp \hbar \hat{L}_z |2\rangle_{\ell, m} \rangle$$

$$\stackrel{(282)}{=} \hbar^2 (\ell(\ell+1) - m^2 \mp m) = |\alpha_{\ell, m}^{\pm}|^2$$

- 178 -

d.h.

$$(285) \quad \hat{L}_{\pm} |2\ell m\rangle = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m\pm 1)} |2\ell m\pm 1\rangle$$

Wirkung der Leiteroperatoren

Es muß $m_{\min} = -\ell$ und $m_{\max} = +\ell$ denn dann

$$(286) \quad \hat{L}_{+} |2\ell \ell\rangle = 0 \quad \hat{L}_{-} |2\ell -\ell\rangle = 0$$

Durch ganzzahlige Anwendung von $\hat{L}_{+}$ muß man von $m_{\min}$ auf $m_{\max}$ kommen, d.h.

$$(287) \quad -\ell + n = \ell \quad n = 2\ell$$

D.h. ℓ ist ganzzahlig oder halbzahlig

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

$$\ell = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$$

$$m =$$

$$-\ell, -(\ell-1), \dots, -1, 0, 1, \dots, (\ell-1), \ell$$

$$-\ell, -(\ell-1), \dots, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \dots, (\ell-1), \ell$$

ungerade Anzahl
von Zuständen

gerade Anzahl
von Zuständen

$$l \quad \text{---} \quad l$$

ganzzahliger Drehimpuls	1	---	3/2	Halbzahliger Drehimpuls
	0	---	1/2	
	-1	---	-1/2	
		---	-3/2	

$$-l \quad \text{---} \quad -l$$

Grenzfall großen l und $m = -l + n$ mit $n \ll l$

$$\begin{aligned} \hat{L}_+ |2l_{e,m}\rangle &= \hbar \sqrt{l(l+1) - (-l+n)(-l+n+1)} |2l_{e,m+1}\rangle \\ &= \hbar \sqrt{2l(n+1) - \cancel{n(n+1)}} |2l_{e,m+1}\rangle \\ &\quad \approx 0 \end{aligned}$$

$$\approx \hbar \sqrt{2l} \sqrt{n+1} |2l_{e,m+1}\rangle$$

$$(288) \quad \hat{L}_+ |2l_{e, \underline{-l+n}}\rangle = \hbar \sqrt{2l} \sqrt{n+1} |2l_{e, \underline{-l+n+1}}\rangle$$

Wie harmonischer Oszillator

D.h. wir können eine approximative Ersetzung machen

$$\boxed{|2l_{e, m=-l+n}\rangle \simeq |n\rangle \quad \hat{a} \simeq \frac{1}{\hbar \sqrt{2l}} \hat{L}_- \quad \hat{a}^\dagger \simeq \frac{1}{\hbar \sqrt{2l}} \hat{L}_+}$$

(289)

5.3 Drehimpuls in Ortsdarstellung

$$\vec{r} \rightarrow \vec{r}$$

$$\vec{p} \rightarrow i\hbar \vec{\nabla}$$

$$L_j = i\hbar \varepsilon_{jke} x_k \frac{\partial}{\partial x_e}$$

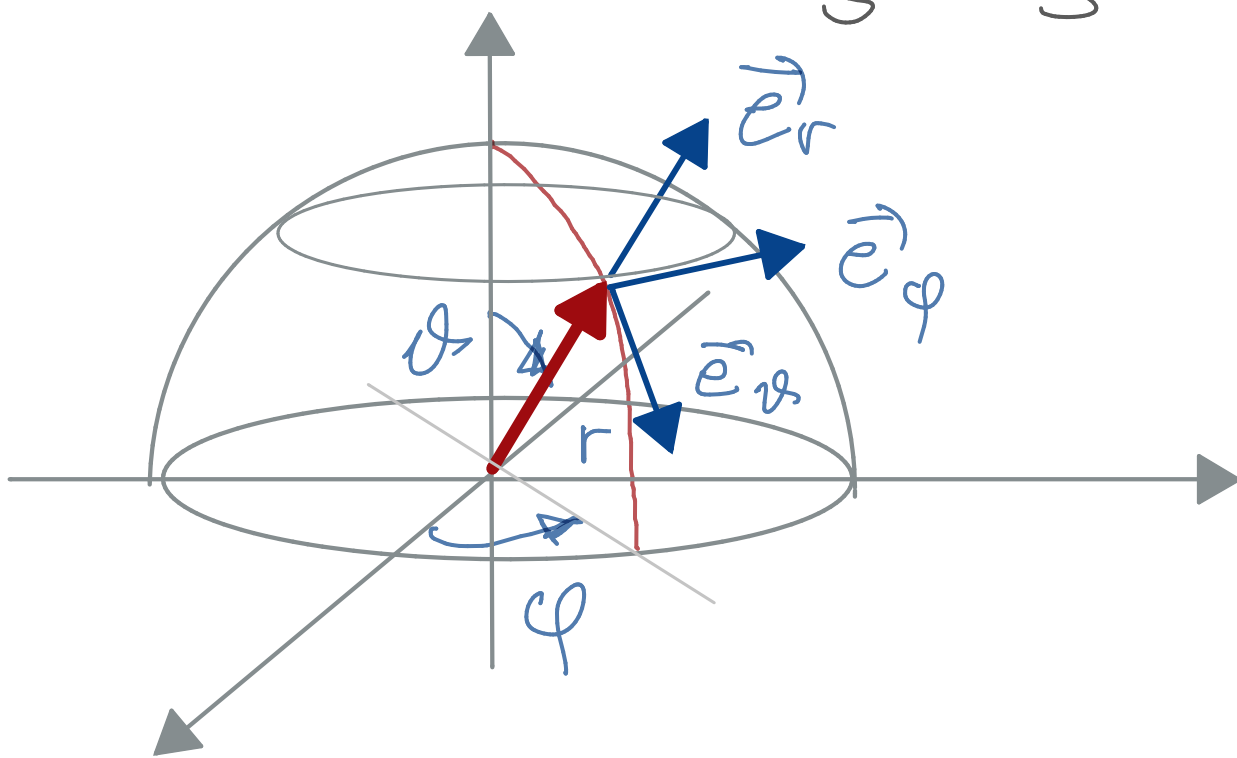
Es ist recht anschaulich Polarkoordinaten einzuführen

$$(290) \quad \begin{aligned} x &= r \sin\theta \cos\varphi \\ y &= r \sin\theta \sin\varphi \\ z &= r \cos\theta \end{aligned}$$

Für Allgemeinen

$$\vec{e}_\xi = \frac{1}{b_\xi} \frac{\partial \vec{r}}{\partial \xi}$$

$$b_\xi = \left| \frac{\partial \vec{r}}{\partial \xi} \right|$$



$$\vec{r} = r (\sin\theta \cos\varphi, \sin\theta \sin\varphi, \cos\theta)$$

$$\vec{e}_r = (\sin\vartheta \cos\varphi, \sin\vartheta \sin\varphi, \cos\vartheta)$$

$$(291) \quad \vec{e}_\vartheta = (\cos\vartheta \cos\varphi, \cos\vartheta \sin\varphi, -\sin\vartheta)$$

$$\vec{e}_\varphi = (-\sin\varphi, \cos\varphi, 0)$$

d.h.

$$(292) \quad \vec{r} = r \vec{e}_r$$

$$(293) \quad \vec{\nabla} = \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\vartheta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \vec{e}_\varphi \frac{1}{r \sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

Damit finden wir

$$(294) \quad \vec{L} = r \vec{e}_r \times (-i\hbar \vec{\nabla}) = -i\hbar \left(\vec{e}_\varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \vec{e}_\vartheta \frac{1}{\sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

nur Ableitung nach Winkeln

$$(295) \quad \begin{aligned} \hat{L}_x &= \vec{e}_x \cdot \vec{L} = i\hbar \left(\sin\varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \cos\varphi \cot\vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ \hat{L}_y &= \vec{e}_y \cdot \vec{L} = i\hbar \left(-\cos\varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \sin\varphi \cot\vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ \hat{L}_z &= \vec{e}_z \cdot \vec{L} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{aligned}$$

und

$$\hat{L}^2 = \vec{L} \cdot \vec{L}$$

Man beachte dabei, daß die Einheitsvektoren in krummlinigen Koordinaten orthonormal sind!

D.h.

$$(296) \quad \frac{\partial}{\partial \varphi} \vec{e}_\vartheta = \cos \vartheta \vec{e}_\varphi ; \quad \frac{\partial}{\partial \vartheta} \vec{e}_\vartheta = -\vec{e}_r$$

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} \vec{e}_\varphi = -\sin \vartheta \vec{e}_r - \cos \vartheta \vec{e}_\vartheta ; \quad \frac{\partial}{\partial \vartheta} \vec{e}_\varphi = 0$$

Damit erhält man $\Rightarrow \dots \Rightarrow$

$$(297) \quad \hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{(\sin \vartheta)^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]$$

Laplace operator in Kugelkoordinaten

siehe z.B. Edgnermik

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta}$$

$$+ \frac{1}{r^2} \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

D.h.

(298)

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2}$$

Radialteil

Rotationsteil

5.4 Eigenfunktionen des Drehimpulses

In der Ortsdarstellung des Drehimpulses taucht der Abstand r vom Bezugspunkt nicht auf!

$$(299) \quad \mathbb{R}^3 \longleftrightarrow \underset{r}{\mathbb{R}_+} \otimes \underset{\vartheta, \varphi}{S^2}$$

D.h. wir suchen Eigenfunktionen im Raum

$$\mathcal{L}^2(S^2, d\Omega) \quad d\Omega = \sin\vartheta d\vartheta d\varphi$$

Skalarprodukt

$$(300) \quad \langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle = \int_0^\pi d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi \sin\vartheta \varphi_1^*(\vartheta, \varphi) \varphi_2(\vartheta, \varphi)$$

$$\boxed{\hat{L}_z}$$

$$\hat{L}_z \varphi_{\ell m}(\vartheta, \varphi) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \varphi_{\ell m}(\vartheta, \varphi) = \hbar m \varphi_{\ell m}$$

$\Rightarrow$
(301)

$$\boxed{\varphi_{\ell m}(\vartheta, \varphi) = e^{im\varphi} \varphi_{\ell m}(\vartheta)}$$

Da gelten muß $\varphi_{\ell m}(\vartheta, \varphi + 2\pi) = \varphi_{\ell m}(\vartheta, \varphi)$

$\Rightarrow$
(302)

$$\boxed{m \in \mathbb{Z} \text{ und } \ell \in \mathbb{Z}}$$

Für den Bahndrehimpuls sind nur ganzzahlige Werte von ℓ und m möglich.

$$\hat{L}^2 Y_{\ell m} = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] Y_{\ell m}$$

$$\stackrel{!}{=} \hbar^2 \ell(\ell+1) Y_{\ell m}$$

Mit Gl. (307) folgt daraus

$$-\left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \sin \theta \frac{d}{d\theta} - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right] u_{\ell m} = \ell(\ell+1) u_{\ell m}$$

Koordinatentransformation $\vartheta = \cos \theta$ $d\vartheta = -\sin \theta d\theta$

$$(303) \quad \frac{d}{d\vartheta} (1-\vartheta^2) \frac{d}{d\vartheta} u_{\ell m} + \left(\ell(\ell+1) - \frac{m^2}{1-\vartheta^2} \right) u_{\ell m} = 0$$

$$(-1 \leq \vartheta \leq 1)$$

Betrachten wir zunächst den Spezialfall

(i) $m=0$

$$(304) \quad \frac{d}{d\vartheta} (1-\vartheta^2) \frac{d}{d\vartheta} u_{\ell 0} + \ell(\ell+1) u_{\ell 0} = 0$$

Legendre'sche Differentialgleichung

Dies ist eine DGL 2. Ordnung $\rightarrow$ 2 fundamentale Lösungen, aber nur eine Quadratintegrabel.

Die Lösungen können z.B. mit der Sommerfeldschen Polynommethode (Abschnitt 3.4) gefunden werden:

$$(305) \quad u_{\text{eo}}(\xi) = P_\ell(\xi) = P_\ell(\cos\alpha)$$

Legendre Polynome

$$(306) \quad P_\ell(\xi) = \frac{1}{2^\ell \ell!} \frac{d^\ell}{d\xi^\ell} (\xi^2 - 1)^\ell$$

$$P_0(\xi) = 1$$

$$P_1(\xi) = \xi$$

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

$$P_3(\xi) = \frac{5}{2}\xi^3 - \frac{3}{2}\xi$$

$\vdots$

$\vdots$

$\leftarrow 31.05$

Eigenschaften

(a) Orthogonalität

$$(307) \quad \int_0^1 d\xi P_\ell(\xi) P_{\ell'}(\xi) = \delta_{\ell\ell'} \frac{2}{2\ell+1}$$

(b) Symmetrie

$$(308) \quad P_\ell(-\xi) = (-1)^\ell P_\ell(\xi)$$

(c) Rekursion

$$(309) \quad (l+1)P_{l+1} = (2l+1)\xi P_l - lP_{l-1}$$

$$(1-\xi^2) \frac{d}{d\xi} P_l = -l\xi P_l + lP_{l-1}$$

(d) erzeugende Funktion

$$(310) \quad \frac{1}{\sqrt{1+s^2-2s\cos\alpha}} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos\alpha) s^l$$

(ii) $m \neq 0$

Ohne nähere Erläuterung sind die Lösungen der DGL (303) für $m \neq 0$ die sog.

zugeordneten Legendrefunktionen

$$(311) \quad 0 \leq m \leq l \quad P_l^m(\xi) = (-1)^m (1-\xi^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{d\xi^m} P_l(\xi)$$

und

$$(312) \quad P_l^{-m}(\xi) = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(\xi)$$

Bem: Definition der P_l^{-m} nicht einheitlich in der Literatur

Zusammenfassung

Kugelflächenfunktionen

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

(313)

(314)

$$\hat{L}_z Y_{\ell}^m(\vartheta, \varphi) = \hbar m Y_{\ell}^m(\vartheta, \varphi)$$

$$\hat{L}^2 Y_{\ell}^m(\vartheta, \varphi) = \hbar^2 \ell(\ell+1) Y_{\ell}^m(\vartheta, \varphi)$$

Orthonormierung

$$\int d\Omega Y_{\ell}^m * Y_{\ell'}^{m'} = \int_0^{\pi} d\vartheta \sin\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi Y_{\ell}^m(\vartheta, \varphi) Y_{\ell'}^{m'}(\vartheta, \varphi)$$

(315)

$$= \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}$$

Die Kugelflächenfunktionen $Y_{\ell}^m(\vartheta, \varphi)$ mit $\ell = 0, 1, 2, \dots$ und $m = -\ell, -\ell+1, \dots, \ell$ bilden ein vollständiges ONS in $L^2(S, d\Omega)$

$$(316) \quad Y_0^0 = \left(\frac{1}{4\pi} \right)^{1/2}$$

$$Y_1^{-1} = \frac{1}{2} \left(\frac{3}{2\pi} \right)^{1/2} \sin\vartheta e^{-i\varphi}$$

$$(317) \quad Y_1^0 = \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{1/2} \cos\vartheta$$

$$Y_1^1 = \frac{1}{2} \left(\frac{3}{2\pi} \right)^{1/2} \sin\vartheta e^{+i\varphi}$$

Es gilt

$$Y_e^0 = \left(\frac{2e+1}{4\pi} \right)^{1/2} P_e(\cos\vartheta)$$

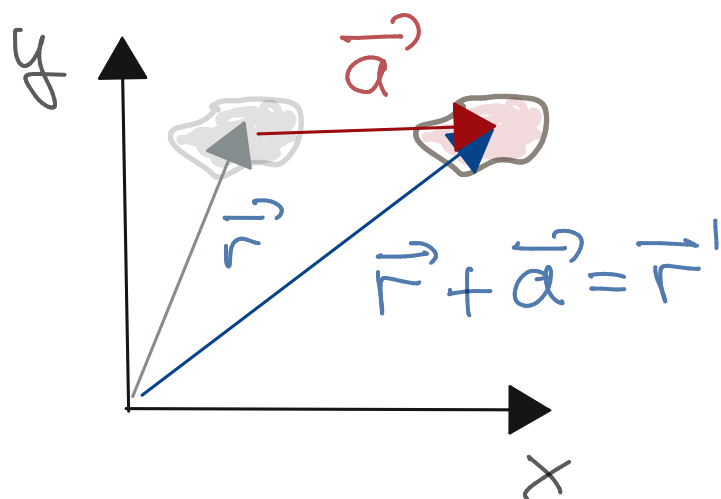
(318)

$$Y_e^{-e} = \frac{1}{2^e e!} \left(\frac{(2e+1)!}{4\pi} \right)^{1/2} \sin^e \vartheta e^{-ie\varphi}$$

5.5 Translationen und Rotationen

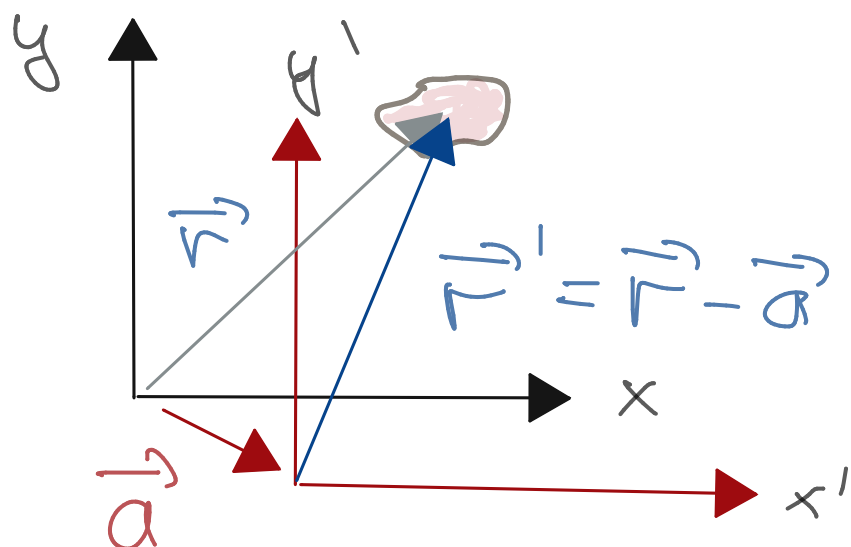
(A) Translation im Ort

aktiv



Verschiebung des Objektes

passiv



Verschiebung des Koordinatensystems

$$|\psi\rangle \longrightarrow |\psi'\rangle$$

Was ist die unitäre Transform. $|\psi'\rangle = U|\psi\rangle$?

passive Interpretation

$$(319) \quad \psi(\vec{r}) = \psi'(\vec{r}') = \psi'(\vec{r} - \vec{a})$$

$$\psi'(\vec{r}) = \psi(\vec{r} + \vec{a}) = U \psi(\vec{r})$$

Taylorreihe

$$\psi(\vec{r} + \vec{a}) = \psi(\vec{r}) + \vec{a} \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{r}) + \frac{1}{2!} (\vec{a} \cdot \vec{\nabla})^2 \psi(\vec{r}) + \dots$$

$$= e^{\vec{a} \cdot \vec{\nabla}} \psi(\vec{r})$$

$$= e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \vec{p}} \psi(\vec{r})$$

$$(320) \quad U(\vec{a}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \vec{p}} \quad U(\vec{a})^{-1} = U(-\vec{a}) = U^\dagger(\vec{a})$$

(i) Die Menge der Operatoren $U(\vec{a})$ der Translation bilden eine Abelsche Gruppe, die kontinuierlich aus dem Einheitsoperator hervorgehen

$$(321) \quad \vec{c} = \vec{a} + \vec{b} \quad U(\vec{c}) = U(\vec{a})U(\vec{b}) = U(\vec{b})U(\vec{a})$$

$$\text{und } \vec{a} \rightarrow 0 \quad U(\vec{a} \rightarrow 0) = \mathbb{I}$$

(ii) Für infinitesimale Verschiebungen gilt

$$(322) \quad U(\vec{a}) \simeq 1 - \frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \vec{p} \quad |\vec{a}| \rightarrow 0$$

Man nennt $\vec{p}$ Generator von Translationen

(iii) Gilt

$$(323) \quad U(\vec{a}) \hat{H} U(\vec{a})^{-1} = \hat{H}$$

So ist das System translation invariant bzgl. der Verschiebung um $\vec{a}$

(iv) Gilt

(324)

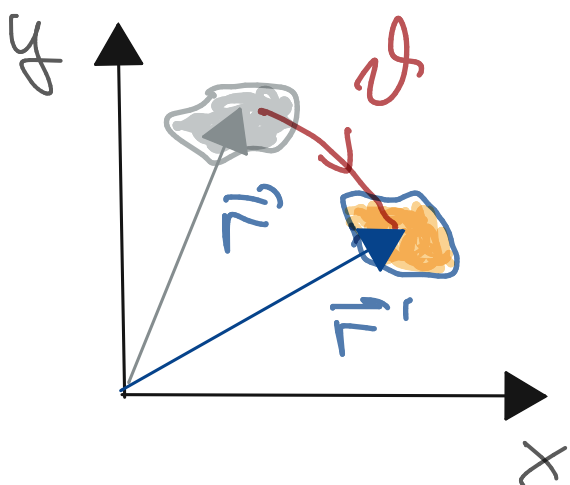
$$U(\vec{a}) \hat{H} U(\vec{a})^{-1} = \hat{H} \quad \forall \vec{a}$$

$$\Leftrightarrow [\hat{H}, \vec{p}] = 0$$

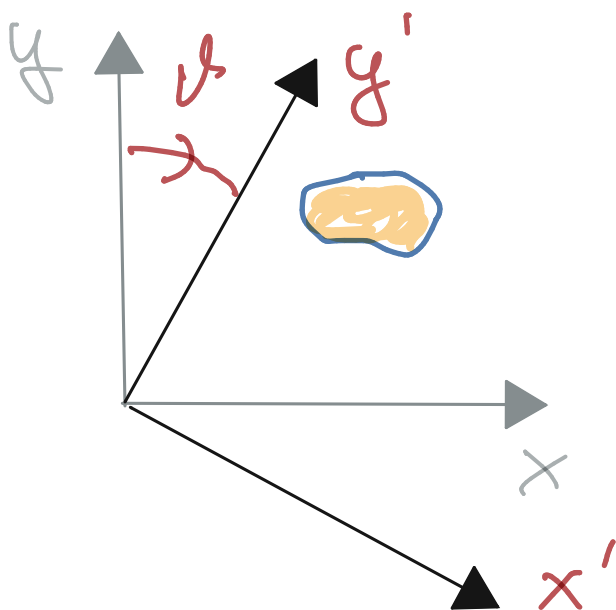
Impuls ist eine Erhaltungsgröße (Noether)

(B) Rotation

aktiv



passiv



$$(325) \quad \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\vartheta & \sin\vartheta \\ -\sin\vartheta & \cos\vartheta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\vartheta & -\sin\vartheta \\ \sin\vartheta & \cos\vartheta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

Passive Interpretation

$$(326) \quad \underline{\underline{D}}(\vartheta) = \begin{pmatrix} \cos\vartheta & -\sin\vartheta \\ \sin\vartheta & \cos\vartheta \end{pmatrix}$$

jetzt in 3D: Drehung um z Achse

$$(327) \quad \underline{\underline{D}}_z(\vartheta) = \begin{pmatrix} \cos\vartheta & -\sin\vartheta & 0 \\ \sin\vartheta & \cos\vartheta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

infinitesimale Drehung

$$\vartheta = \varepsilon \ll 2\pi$$

$$(328) \quad \underline{\underline{D}}_z(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 & -\varepsilon & 0 \\ \varepsilon & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \underline{\underline{D}}_x(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -\varepsilon \\ 0 & \varepsilon & 1 \end{pmatrix}$$

$$\underline{\underline{D}}_y(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \varepsilon \\ 0 & 1 & 0 \\ -\varepsilon & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Drehungen sind nicht kommutativ, bilden aber eine Gruppe $\rightarrow$ nicht Abelsche Gruppe:

$$\begin{aligned}
 \underline{\underline{D}}_x(\varepsilon) \underline{\underline{D}}_y(\varepsilon) - \underline{\underline{D}}_y(\varepsilon) \underline{\underline{D}}_x(\varepsilon) &= \\
 (329) \quad &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -\varepsilon \\ 0 & \varepsilon & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & \varepsilon \\ 0 & 1 & 0 \\ -\varepsilon & 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 0 & \varepsilon \\ 0 & 1 & 0 \\ -\varepsilon & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -\varepsilon \\ 0 & \varepsilon & 1 \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} 0 & -\varepsilon^2 & 0 \\ \varepsilon^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \underline{\underline{D}}_z(\varepsilon^2) - \mathbb{I}
 \end{aligned}$$

Was ist die unitäre Transformation $\hat{D}$ der (passiven) Drehung?

$$|\psi\rangle \longrightarrow |\psi'\rangle = \hat{D}|\psi\rangle$$

Wir wissen in Ortsdarstellung

$$(330) \quad \boxed{\hat{D}\psi(\vec{r}) = \psi(\underline{\underline{D}}^{-1}\vec{r})}$$

Betrachten wir infinitesimale Drehungen: $\hat{D}_2(\varepsilon)$

$$\hat{D}_2(\varepsilon)\psi(\vec{r}) = \psi(\underline{\underline{D}}_2^{-1}(\varepsilon)\vec{r}) = \psi(\underline{\underline{D}}_2(-\varepsilon)\vec{r})$$

$$= \psi(x + \varepsilon y, y - \varepsilon x, z) + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$$

$$\begin{aligned}
 &= \psi(x, y, z) + \varepsilon \left(y \frac{\partial \psi}{\partial x} - x \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \\
 \text{Taylor} \quad &\underbrace{\hspace{10em}} \\
 &= -\frac{i}{\hbar} \hat{L}_z
 \end{aligned}$$

d.h.
(331)

$$\hat{D}_z(\varepsilon) = \mathbb{1} - \frac{i\varepsilon}{\hbar} \hat{L}_z$$

Jetzt betrachten wir eine endliche Drehung

$$\vartheta = n\varepsilon$$

$$\varepsilon \rightarrow 0, n \rightarrow \infty$$

$$\hat{D}_z(\vartheta) = [\hat{D}_z(\varepsilon)]^n = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{i\vartheta}{\hbar n} \hat{L}_z\right)^n$$

(332)

$$\hat{D}_z(\vartheta) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \vartheta \hat{L}_z \right\}$$

Das kann auf eine Drehung um beliebige Achse $\vec{n}$ mit Winkel ϑ verallgemeinert werden

(333)

$$\hat{D}_{\vec{n}}(\vartheta) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \vartheta \vec{n} \cdot \vec{L} \right\}$$

(i) Drehungen bilden eine nicht-Abelsche Gruppe mit dem Drehimpuls als Generator

(ii) $\hat{D}_{\vec{n}}^{-1}(\vartheta) H \hat{D}_{\vec{n}}(\vartheta) = H$ bedeutet das

System ist invariant unter Drehungen in Richtung $\vec{n}$ um den Winkel ϑ .

(iii) Falls $\hat{D}_{\vec{n}}(\beta) H \hat{D}_{\vec{n}}^\dagger(\beta) = H \quad \forall \beta \in (0, 2\pi)$

(334) folgt

$$\boxed{[\hat{H}, \vec{n} \cdot \vec{L}] = 0}$$

$\vec{n} \cdot \vec{L}$ ist Erhaltungsgröße?

(iv) Gl. (333) kann auch als Definition des Drehimpulses aufgefasst werden

Vertauschungsregeln des Drehimpulses aus Rotationen

Wenn wir Gl. (333) als Definitionsgleichung des Drehimpulses auffassen müssen sich aus ihr die Vertauschungsregeln des Drehimpulses ableiten lassen. Das ist tatsächlich der Fall:

Dazu betrachten wir Gl. (329)

$$\underline{\underline{D_x(\varepsilon) D_y(\varepsilon) - D_y(\varepsilon) D_x(\varepsilon) = D_z(\varepsilon^2) - 1}}$$

$$(335) \Rightarrow \hat{D}_x(\varepsilon) \hat{D}_y(\varepsilon) - \hat{D}_y(\varepsilon) \hat{D}_x(\varepsilon) = \hat{D}_z(\varepsilon^2) - 1$$

Mit Gl. (331) und analogen Gleichungen ist Gl. (335)

$$\begin{aligned}
& \left(1 - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{L}_x - \frac{1}{2\hbar^2} \varepsilon^2 \hat{L}_x^2\right) \left(1 - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{L}_y - \frac{1}{2\hbar^2} \varepsilon^2 \hat{L}_y^2\right) \\
& - \left(1 - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{L}_y - \frac{1}{2\hbar^2} \varepsilon^2 \hat{L}_y^2\right) \left(1 - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{L}_x - \frac{1}{2\hbar^2} \varepsilon^2 \hat{L}_x^2\right) \\
& = -\frac{\varepsilon^2}{\hbar^2} [\hat{L}_x, \hat{L}_y] + \mathcal{O}(\varepsilon^3) \\
& \stackrel{!}{=} \cancel{1} - \frac{i \hat{L}_z}{\hbar} \varepsilon^2 - \cancel{1} + \mathcal{O}(\varepsilon^3)
\end{aligned}$$

$$(336) \Rightarrow \boxed{[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z} \quad \square$$

D.h. wir erhalten exakt die Vertauschungsregeln des Drehimpulses! ← 01.06.

VI. Einteilchenquantenmechanik in 3 Dimensionen

6.1 Das freie Teilchen in 3D

Hamiltonoperator

$$(337) \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \quad \text{in Ortsdarstellung}$$