

5.3 Ortsdarstellung des Bahndrehimpulses

[Münster 2.2-4; Fließbach 23]

69

Die Komponenten des Bahndrehimpulses $\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}$ erfüllen die Drehimpulsalgebra; die möglichen Eigenwerte von $\hat{L}^2, \hat{L}_3$ sind also schon bekannt. Aber $\hat{\vec{L}}$ hat auch zusätzliche Eigenschaften, die für einen allgemeinen $\hat{\vec{J}}$ nicht vorhanden sind: so gilt zum Beispiel

$$\hat{\vec{r}} \cdot \hat{\vec{L}} = \hat{x}_i \hat{x}_j \hat{p}_k \epsilon_{ijk} = \hat{0}.$$

symmetrisch in $i \leftrightarrow j$ $\uparrow$ $\downarrow$ antisymmetrisch in $i \leftrightarrow j$

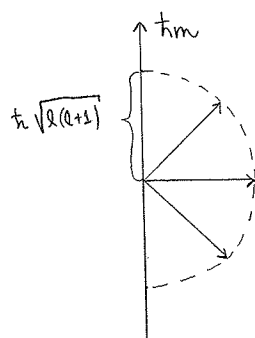
Wir möchten die folgenden Eigenschaften von $\hat{\vec{L}}$ feststellen:

$$(i) \quad \hat{L}^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle$$

$$\hat{L}_3 |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle$$

$$l \in \{0, 1, 2, 3, \dots\} \quad \underline{\underline{\text{ganzzahlig!}}}$$

$$m \in \{-l, -l+1, \dots, l-1, l\}$$



(ii) Der Impulsteil $\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}$ des Hamilton-Operators kann in Ortsdarstellung, und zwar mit Kugelkoordinaten, als

$$\langle \vec{r} | \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} | \vec{r}' \rangle = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right] + \frac{1}{2m r^2} \hat{L}^2 \right\} \delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}')$$

ausgedrückt werden.

(iii) $\hat{L}^2$ und $\hat{L}_3$ operieren nur auf die Winkelkoordinaten.

Die entsprechenden Wellenfunktionen,

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

sind orthonormiert, bilden eine vollständige Menge, und können explizit bestimmt werden. Sie werden die „Kugelflächenfunktionen“ genannt.

(i) Die Ganzzahligkeit von l ist nicht ganz trivial zu beweisen; wir folgen hier Münster (9.3.2). [Intuitiv: Seite 72 $\Rightarrow Y_{l,m}(\theta, \varphi) = e^{im\varphi} f(\theta)$. Kontinuität verlangt $e^{im(\varphi_0 + 2\pi)} = e^{im\varphi_0} \Rightarrow m \in \mathbb{Z} \Rightarrow l \in \mathbb{Z}$.]

Definitionen: $\hat{a}_j := \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \left(\hat{x}_j + i\hat{p}_j \right) ; \hat{a}_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \left(\hat{x}_j - i\hat{p}_j \right) ; j=1,2$

$$\hat{A} := \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}_1 + i\hat{a}_2) ; \hat{A}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}_1^\dagger - i\hat{a}_2^\dagger)$$

$$\hat{B} := \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}_1 - i\hat{a}_2) ; \hat{B}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}_1^\dagger + i\hat{a}_2^\dagger)$$

Ausgehend von $[\hat{x}_j, \hat{x}_k] = [\hat{p}_j, \hat{p}_k] = 0, [\hat{x}_j, \hat{p}_k] = i\hbar \delta_{jk}$ folgt:

$$[\hat{a}_1, \hat{a}_2] = [\hat{a}_1^\dagger, \hat{a}_2^\dagger] = [\hat{a}_1, \hat{a}_2^\dagger] = [\hat{a}_1^\dagger, \hat{a}_2] = \hat{0}$$

$$[\hat{a}_1, \hat{a}_1^\dagger] = [\hat{a}_2, \hat{a}_2^\dagger] = \hat{1}$$

$$\Rightarrow [\hat{A}, \hat{B}] = [\hat{A}^\dagger, \hat{B}^\dagger] = \hat{0}$$

$$[\hat{A}, \hat{A}^\dagger] = [\hat{B}, \hat{B}^\dagger] = \hat{1}$$

$$[\hat{A}, \hat{B}^\dagger] = \frac{1}{2} ([\hat{a}_1, \hat{a}_1^\dagger] - [\hat{a}_2, \hat{a}_2^\dagger]) = \hat{0} = [\hat{B}, \hat{A}^\dagger]$$

$\Rightarrow$ wie zwei unabhängige harmonische Oszillatoren!

Damit gilt:

$$\begin{aligned} \hat{L}_3 &= \hat{x}_1 \hat{p}_2 - \hat{x}_2 \hat{p}_1 \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2}} (\hat{a}_1 + \hat{a}_1^\dagger) \frac{1}{i} \sqrt{\frac{\hbar}{2}} (\hat{a}_2 - \hat{a}_2^\dagger) - (2 \leftrightarrow 1) \\ &= \frac{\hbar}{2i} \left[\cancel{\hat{a}_1 \hat{a}_2} - \hat{a}_1 \hat{a}_2^\dagger + \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 - \cancel{\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^\dagger} \right. \\ &\quad \left. - \cancel{\hat{a}_2 \hat{a}_1} + \hat{a}_2 \hat{a}_1^\dagger - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1 + \cancel{\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1^\dagger} \right] \\ &= \frac{\hbar}{i} (\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1) \end{aligned}$$

Auf der anderen Seite:

$$\begin{aligned} \hat{A}^\dagger \hat{A} &= \frac{1}{2} (\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 + i\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 - i\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1) \\ \hat{B}^\dagger \hat{B} &= \frac{1}{2} (\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 - i\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2 + i\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1) \end{aligned}$$

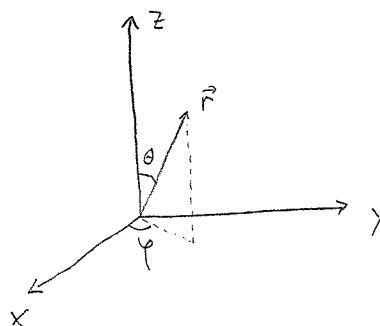
$$\Rightarrow \hat{L}_3 = \hbar [\hat{B}^\dagger \hat{B} - \hat{A}^\dagger \hat{A}] \Rightarrow m \text{ ganzzahlig}$$

Seiten 58-59 $\Rightarrow$ Eigenwerte ganzzahlig

$\Rightarrow l$ ganzzahlig. $\square$

(ii)

Kugelkoordinaten:



71

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

$$\nabla = \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

In Ortsdarstellung ist $\langle \vec{r} | \hat{p} | \vec{r}' \rangle = -i\hbar \nabla \delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}')$,
und $\hat{L} = -i\hbar \vec{r} \times \nabla$, mit Komponenten (Aufgabe 10.1)

$$\hat{L}_1 = -i\hbar \left[-\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cos \varphi \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right],$$

$$\hat{L}_2 = -i\hbar \left[\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \sin \varphi \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right],$$

$$\hat{L}_3 = -i\hbar \left[\frac{\partial}{\partial \varphi} \right].$$

Es folgt:

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 &= -\hbar^2 \left\{ \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cos \varphi \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cos \varphi \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right. \\ &\quad \left. + \left(\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \sin \varphi \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \left(\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \sin \varphi \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= -\hbar^2 \left\{ \sin^2 \varphi \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \sin \varphi \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] + \cos \varphi \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \left[\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} \right] \right. \\ &\quad \left. + \cos^2 \varphi \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - \sin \varphi \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] - \sin \varphi \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \left[\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} \right] \right. \\ &\quad \left. + \cot^2 \theta \left[\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) + \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right] + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} \end{aligned}$$

$$= -\hbar^2 \left\{ \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + [1 + \cot^2 \theta] \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\}$$

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

(EMTPII / Seite 34)

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right] + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\}$$

$$\Rightarrow \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right] + \frac{1}{2m r^2} \hat{L}^2$$

Vgl. klassisch: $\vec{L}^2 = (\vec{r} \times \vec{p}) \cdot (\vec{r} \times \vec{p}) = \varepsilon_{ijk} x_j p_k \varepsilon_{ilm} x_l p_m = (\delta_{jl} \delta_{km} - \delta_{jm} \delta_{kl}) x_j p_k x_l p_m$
 $= \vec{r}^2 \vec{p}^2 - (\vec{r} \cdot \vec{p})^2 \Rightarrow \vec{p}^2 = (\vec{e}_r \cdot \vec{p})^2 + \frac{1}{r^2} \vec{L}^2$
↑
Radialrichtung

- (iii) • Die Orthonormierung der Eigenzustände folgt wie früher für einen allgemeinen hermiteschen Operator. Das Integrationsmaß muß allerdings in Kugelkoordinaten ausgedrückt werden:

$$\int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi Y_{l,m}^*(\theta, \varphi) Y_{l',m'}(\theta, \varphi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

- Vollständigkeit: $\psi(\theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l a_{lm} Y_{lm}(\theta, \varphi)$;
(alle Darstellungen bekannt)
 $a_{lm} = \int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi Y_{lm}^*(\theta, \varphi) \psi(\theta, \varphi)$

- Konstruktion: man benutze die Leiteroperatoren von Seite 66:

$$\begin{aligned} \hat{L}_{\pm} &= \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y = \hbar \left\{ [\sin\varphi \pm i\cos\varphi] \frac{\partial}{\partial\theta} + i[\cos\varphi \pm i\sin\varphi] \cot\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right\} \\ &= \hbar e^{\pm i\varphi} \left\{ \pm \frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right\} \\ \hat{L}_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi} \end{aligned}$$

Also:

$$* \hat{L}_z |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle \Rightarrow \frac{\partial}{\partial\varphi} Y_{l,m}(\theta, \varphi) = im Y_{l,m}(\theta, \varphi)$$

$$\Rightarrow Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}} F_{l,m}(\theta)$$

$$* \hat{L}_+ |l, l\rangle = 0 \Rightarrow \left\{ \frac{\partial}{\partial\theta} - l \cot\theta \right\} F_{l,l}(\theta) = 0$$

$$\Rightarrow F_{l,l}(\theta) = K_l \cdot (\sin\theta)^l$$

Die Konstante K_l kann aus $\int_0^\pi d\theta \sin\theta |F_{l,l}(\theta)|^2 = 1$ bestimmt werden.

$$* \langle \theta, \varphi | l, l-1 \rangle = \frac{1}{C_{-(l,l)}} \hat{L}_- \langle \theta, \varphi | l, l \rangle \quad \text{usw. (Aufgabe 10.2).}$$

Seite 68