5.3 Ortsdarstellung des Bahndrehimpulses [Fliessbach 23, Griffiths 4.1]

Die Komponenten des Bahndrehimpulses $\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}$ erfüllen die Drehimpulsalgebra; die möglichen Eigenwerte von $\hat{\vec{L}}^2$, $\hat{L}_3$ 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

$$\hat{\vec{r}} \cdot \hat{\vec{L}} = \underbrace{\hat{x}_i \hat{x}_j}_{\text{symmetrisch in } i \leftrightarrow j} \hat{p}_k \underbrace{\varepsilon_{ijk}}_{\text{antisymmetrisch in } i \leftrightarrow j} = \hat{0} \, .$$

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

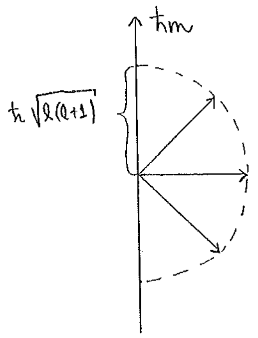
(i)

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

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

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

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



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

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

ausgedrückt werden.

(iii) $\hat{\vec{L}}^2$ 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 $\Rightarrow$ $Y_{\ell,m}(\theta,\varphi) = e^{im\varphi} f(\theta)$. Kontinuität verlangt $e^{im(\varphi_0+2\pi)} = e^{im\varphi_0}$ $\Rightarrow$ $m \in \mathbb{Z}$ $\Rightarrow$ $\ell \in \mathbb{Z}$.]

*Gernot Münster, Quantentheorie.

Definitionen:

$$\hat a_j := \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\hat x_j + i\hat p_j\right) \quad ; \quad \hat a_j^+ = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\hat x_j - i\hat p_j\right) \quad : \quad j = 1,2$$

$$\hat A := \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat a_1 + i\hat a_2\right) \quad ; \quad \hat A^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat a_1^+ - i\hat a_2^+\right)$$

$$\hat B := \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat a_1 - i\hat a_2\right) \quad ; \quad \hat B^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat a_1^+ + i\hat a_2^+\right)$$

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:

$$[\hat a_1, \hat a_2] = [\hat a_1^+, \hat a_2^+] = [\hat a_1, \hat a_2^+] = [\hat a_1^+, \hat a_2] = \hat{\emptyset}$$

$$[\hat a_1, \hat a_1^+] = [\hat a_2, \hat a_2^+] = \hat{\mathbb{1}}$$

$$\Rightarrow \quad [\hat A, \hat B] = [\hat A^+, \hat B^+] = \hat{\emptyset}$$

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

$$[\hat A, \hat B^+] = \frac{1}{2}\left([\hat a_1, \hat a_1^+] - [\hat a_2, \hat a_2^+]\right) = \hat{\emptyset} = [\hat B, \hat A^+]$$

$\Rightarrow$ wie zwei unabhängige harmonische Oszillatoren!

Damit gilt:

$$\begin{aligned}
\hat L_3 &= \hat x_1 \hat p_2 - \hat x_2 \hat p_1 \\
&= \sqrt{\tfrac{\hbar}{2}}\left(\hat a_1 + \hat a_1^+\right)\frac{1}{i}\sqrt{\tfrac{\hbar}{2}}\left(\hat a_2 - \hat a_2^+\right) \quad - \quad (2 \leftrightarrow 1) \\
&= \frac{\hbar}{2i}\Big[\cancel{\hat a_1 \hat a_2} - \hat a_1 \hat a_2^+ + \hat a_1^+ \hat a_2 - \cancel{\hat a_1^+ \hat a_2^+} \\
&\qquad - \cancel{\hat a_2 \hat a_1} + \hat a_2 \hat a_1^+ - \hat a_2^+ \hat a_1 + \cancel{\hat a_2^+ \hat a_1^+}\Big] \\
&= \frac{\hbar}{i}\left(\hat a_1^+ \hat a_2 - \hat a_2^+ \hat a_1\right)
\end{aligned}$$

Auf der anderen Seite:

$$\hat A^+ \hat A = \frac{1}{2}\left(\hat a_1^+ \hat a_1 + \hat a_2^+ \hat a_2 + i\,\hat a_1^+ \hat a_2 - i\,\hat a_2^+ \hat a_1\right)$$

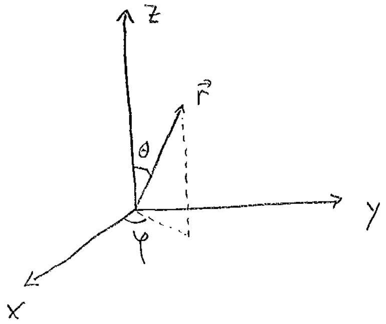
$$\hat B^+ \hat B = \frac{1}{2}\left(\hat a_1^+ \hat a_1 + \hat a_2^+ \hat a_2 - i\,\hat a_1^+ \hat a_2 + i\,\hat a_2^+ \hat a_1\right)$$

$$\Rightarrow \quad \hat L_3 = \hbar\left[\hat B^+ \hat B - \hat A^+ \hat A\right] \quad \Rightarrow \quad m \text{ ganzzahlig}$$

Seiten 58-59 $\Rightarrow$ Eigenwerte ganzzahlig

$\Rightarrow$ ℓ ganzzahlig. $\square$

(ii) Kugelkoordinaten :



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

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

In Ortsdarstellung ist $\langle \vec{r} | \hat{\vec{p}} | \vec{r}\,' \rangle = -i\hbar \nabla \, \delta^{(3)}(\vec{r}-\vec{r}\,')$,
und $\hat{\vec{L}} = -i\hbar\, \vec{r} \times \nabla$, mit Komponenten (Aufgabe 5.1)

$$\hat{L}_1 = -i\hbar \left[-\sin\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} - \cos\varphi \cot\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right],$$
$$\hat{L}_2 = -i\hbar \left[\cos\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} - \sin\varphi \cot\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right],$$
$$\hat{L}_3 = -i\hbar \left[\frac{\partial}{\partial\varphi} \right].$$

Es folgt:

- $$\hat{\vec{L}}^2 = -\hbar^2 \Big\{ \left(\sin\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + \cos\varphi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\left(\sin\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + \cos\varphi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) + \left(\cos\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} - \sin\varphi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\left(\cos\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} - \sin\varphi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) + \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \Big\}$$

$$= -\hbar^2 \Big\{ \sin^2\varphi \frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \sin\varphi\cos\varphi \cancel{\frac{\partial}{\partial\theta}}\left[\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right] + \cos\varphi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\left[\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}\right] + \cos^2\varphi\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} - \sin\varphi\cos\varphi \cancel{\frac{\partial}{\partial\theta}}\left[\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right] - \sin\varphi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\left[\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}\right] + \cot^2\theta\left[\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) + \sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\right] + \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \Big\}$$

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

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

MMP II / Seite 30

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

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

Vgl. klassisch: $\vec{L}^2 = (\vec{r}\times\vec{p})\cdot(\vec{r}\times\vec{p}) = \varepsilon_{ijk}\, x_j p_k\, \varepsilon_{ilm}\, x_l p_m = (\delta_{jl}\delta_{km} - \delta_{jm}\delta_{kl})\, x_j p_k x_l p_m$

$= \vec{r}^{\,2}\vec{p}^{\,2} - (\vec{r}\cdot\vec{p})^2 \quad \Rightarrow \quad \vec{p}^{\,2} = (\vec{e}_r\cdot\vec{p})^2 + \frac{1}{r^2}\vec{L}^2 .$

Radialrichtung

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

$$\int_0^{\pi} d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \; Y^*_{\ell,m}(\theta,\varphi)\, Y_{\ell',m'}(\theta,\varphi) = \delta_{\ell\ell'}\,\delta_{mm'} \quad .$$

• Vollständigkeit:

$$f(\theta,\varphi) = \sum_{\ell=0}^{\infty}\sum_{m=-\ell}^{\ell} a_{\ell m}\, Y_{\ell,m}(\theta,\varphi) \;;$$

$$a_{\ell,m} = \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \; Y^*_{\ell,m}(\theta,\varphi)\, f(\theta,\varphi) \quad .$$

• Konstruktion: man benutze die Leiteroperatoren von Seite 66:

$$\hat{L}_\pm = \hat{L}_1 \pm i\hat{L}_2 = \hbar\left\{[i\sin\varphi \pm \cos\varphi]\frac{\partial}{\partial\theta} + i[\cos\varphi \pm i\sin\varphi]\cot\theta\,\frac{\partial}{\partial\varphi}\right\}$$

$$= \hbar\, e^{\pm i\varphi}\left\{\pm\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\,\frac{\partial}{\partial\varphi}\right\}$$

$$\hat{L}_3 = -i\hbar\,\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

Also:

$$* \quad \hat{L}_3|\ell,m\rangle = \hbar m|\ell,m\rangle \;\Rightarrow\; \frac{\partial}{\partial\varphi} Y_{\ell,m}(\theta,\varphi) = im\, Y_{\ell,m}(\theta,\varphi)$$

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

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

$$\Rightarrow\; F_{\ell,\ell}(\theta) = K_\ell\,(\sin\theta)^\ell \quad .$$

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

$$* \quad \langle\theta,\varphi|\ell,\ell-1\rangle = \frac{1}{C_-(\ell,\ell)}\,\hat{L}_-\langle\theta,\varphi|\ell,\ell\rangle \;, \text{ usw (Aufgabe 6.1).}$$

Seite 68

———— o ————