$\hat{\underline{L}} = \hat{\underline{r}} \times \hat{\underline{p}}$ Bahndrehimpulsoperator

$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \hat{L}_k$ $\quad$ i, j, k zyklische Indizes

$i, j = x, y, z$

$[\hat{\underline{L}}^2, \hat{L}_i] = 0$

physikalisch entspricht $\hat{\underline{L}}^2$ dem Betragsquadrat des Drehimpuls

typischerweise betrachtet man $\hat{\underline{L}}^2, \hat{L}_z$ ← gemeinsames System von EZ

$\hat{\underline{L}}^2 |\alpha, \beta\rangle = \alpha |\alpha, \beta\rangle$

$\hat{L}_z |\alpha, \beta\rangle = \beta |\alpha, \beta\rangle$ $\quad$ Lösung dieses Eigenwertproblem?

Lösung durch Leiteroperatoren: $\quad \hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$

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

VI.2. Lösung des Eigenwertproblems

wir hatten bereits:

$$\alpha \geq \beta^2 \geq 0$$

Hermitizität von $\hat{L}_z, \hat{\underline{L}}^2$

$$\Longleftrightarrow -\sqrt{\alpha} \leq \beta \leq \sqrt{\alpha}$$

Weiteres Vorgehen wie beim harmon. Oszillator

Zeige zunächst: mit $|\alpha, \beta\rangle$ sind auch die Zustände $\hat{L}_\pm |\alpha, \beta\rangle$ wieder EZ zu $\hat{\underline{L}}^2$ und $\hat{L}_z$!

$$\hat{\underline{L}}^2 (\hat{L}_\pm |\alpha,\beta\rangle) \underset{\substack{\uparrow \\ \text{da } [\hat{\underline{L}}^2, L_\pm] = 0}}{=} \hat{L}_\pm \hat{\underline{L}}^2 |\alpha,\beta\rangle = \alpha (\hat{L}_\pm |\alpha,\beta\rangle)$$

EW von $\hat{\underline{L}}^2$ bleibt also ungeändert!

$$\hat{L}_z (\hat{L}_\pm |\alpha,\beta\rangle) \underset{\substack{\uparrow \\ [\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] = \pm\hbar \hat{L}_\pm \to \ddot{u}}}{=} (\hat{L}_\pm \hat{L}_z \pm \hbar \hat{L}_\pm) |\alpha,\beta\rangle$$

$$= \beta \hat{L}_\pm |\alpha,\beta\rangle \pm \hbar \hat{L}_\pm |\alpha,\beta\rangle$$

benutze $\hat{L}_z |\alpha,\beta\rangle = \beta |\alpha,\beta\rangle$

$$= (\beta \pm \hbar)(\hat{L}_\pm |\alpha,\beta\rangle)$$

Anwendung von $\hat{L}_\pm$ erhöht bzw. erniedrigt den Eigenwert von $\hat{L}_z$ um $\hbar$!

Beachte:
Da gleichzeitig $-\sqrt{\alpha} \leq \beta \leq \sqrt{\alpha}$ gelten muß, muß es einen größten bzw. kleinsten EW β_{max} bzw. β_{min} geben

für den gilt:

Aufsteiger $\to$ $\hat{L}_+ |\alpha, \beta_{max}\rangle \overset{!}{=} 0$

Absteiger $\to$ $\hat{L}_- |\alpha, \beta_{min}\rangle \overset{!}{=} 0$

Folgerungen:

$$\hat{L}_- \underbrace{\hat{L}_+ |\alpha, \beta_{max}\rangle}_{0} = 0$$

$$= (\hat{L}_x - i\hat{L}_y)(\hat{L}_x + i\hat{L}_y)|\alpha, \beta_{max}\rangle$$

$$= (\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \underbrace{i\hat{L}_x\hat{L}_y - i\hat{L}_y\hat{L}_x}_{i[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = -\hbar\hat{L}_z})|\alpha, \beta_{max}\rangle$$

$$= (\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 - \hbar\hat{L}_z)|\alpha, \beta_{max}\rangle$$

$$= (\underline{\hat{L}}^2 - \hat{L}_z^2 - \hbar\hat{L}_z)|\alpha, \beta_{max}\rangle$$

$$\Rightarrow 0 \overset{!}{=} (\alpha - \beta_{max}^2 - \hbar\beta_{max})|\alpha, \beta_{max}\rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{\alpha \overset{!}{=} \beta_{max}^2 + \hbar\beta_{max}} \quad (1)$$

$$\underline{\hat{L}}^2 |\alpha, \beta\rangle = \alpha |\alpha, \beta\rangle$$

$$\hat{L}_z |\alpha, \beta\rangle = \beta |\alpha, \beta\rangle$$

analog

$$\hat{L}_+ \underbrace{\hat{L}_- |\alpha, \beta_{min}\rangle}_{0} = 0$$

$$= (\underline{\hat{L}}^2 - \hat{L}_z^2 + \hbar\hat{L}_z)|\alpha, \beta_{min}\rangle$$

$$= (\alpha - \beta_{min}^2 + \hbar\beta_{min})|\alpha, \beta_{min}\rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{\alpha \overset{!}{=} \beta_{min}^2 - \hbar\beta_{min}} \quad (2)$$

(1) und (2) legen β_{max} und β_{min} für festes α fest!

Weitere Relationen findet man durch

Verwendung der Kommutator $[\hat{L}_z, \hat{L}_\pm^n] = \pm n\hbar \hat{L}_\pm^n$

mit $n \in \mathbb{N}$!

$\hat{L}_\pm^n$ ist auch wieder EZ !

denn $\hat{L}_z(\hat{L}_\pm^n |\alpha,\beta\rangle) \underset{\uparrow}{=} (\hat{L}_\pm^n \hat{L}_z \pm n\hbar \hat{L}_\pm^n)|\alpha,\beta\rangle$

Kommutator

$= (\beta \pm n\hbar)(\hat{L}_\pm^n |\alpha,\beta\rangle)$

(außerdem: $\underline{\hat{L}}^2(\hat{L}_\pm^n |\alpha\beta\rangle) = \alpha(\hat{L}_\pm^n |\alpha,\beta\rangle)$)

$\Rightarrow$ Es muß also ein $n \in \mathbb{N}$ geben mit

$$|\alpha,\beta_{max}\rangle \overset{!}{=} (\hat{L}_+^n)|\alpha,\beta_{min}\rangle$$

Folgerung: $\hat{L}_z|\alpha,\beta_{max}\rangle \overset{!}{=} \hat{L}_z(\hat{L}_+^n|\alpha,\beta_{min}\rangle)$

$$\beta_{max}|\alpha,\beta_{max}\rangle = (\hat{L}_+^n \hat{L}_z + n\hbar \hat{L}_+^n)|\alpha,\beta_{min}\rangle$$

$$= (\beta_{min} + n\hbar)\hat{L}_+^n|\alpha,\beta_{min}\rangle$$

$$= (\beta_{min} + n\hbar)|\alpha,\beta_{max}\rangle$$

Damit $\boxed{\beta_{max} = \beta_{min} + n\hbar}$ (*)

Kombiniere (*) mit (1) und (2)

$$\underbrace{\beta_{max}^2 + \hbar\beta_{max}}_{\alpha} = \underbrace{\beta_{min}^2 - \hbar\beta_{min}}_{\alpha}$$

einsetzen in (*)

$$\underbrace{\cancel{\beta_{min}^2} + 2n\hbar\beta_{min} + n^2\hbar^2}_{\beta_{max}^2} + \underbrace{\hbar\beta_{min} + n\hbar^2}_{\hbar\beta_{max}} = \cancel{\beta_{min}^2} - \hbar\beta_{min}$$

$$\beta_{min}\underbrace{(2n\hbar + \hbar + \hbar)}_{2\hbar(\cancel{n+1})} = -\hbar^2(n^2+n) = -\hbar^2 n\cancel{(n+1)}$$

$$\Rightarrow \beta_{min} = \frac{-\hbar^2 n}{2\hbar} = -\frac{n}{2}\hbar$$

Beachte: n ist ganzzahlig ($n \in \mathbb{N}$)

führe $l = \frac{n}{2}$

l ist ganzzahlig oder halbzahlig

also: $\boxed{\beta_{min} = -l\hbar}$

Damit

$$\beta_{max} \underset{\uparrow \atop (*)}{=} \beta_{min} + n\hbar = -l\hbar + 2l\hbar = \underline{\underline{l\hbar}}$$

$$\alpha \underset{\uparrow \atop (2)}{=} \beta_{min}^2 - \hbar\beta_{min} = l^2\hbar^2 + \hbar^2 l = l(l+1)\hbar^2$$

<u>Zusammenfassung</u>

i) Die möglichen EW von $\underline{L}^2$ sind

$$\alpha = l(l+1)\hbar^2$$

mit $l = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \ldots$

ii) Die mögliche EW von $\hat{L}_z$ sind

$$\beta = m\hbar$$

$m = -l, -l+1, \ldots, l-1, l$

<u>„Drehimpuls - Quantelung"</u>

Folgerung aus der Nichtvertauschbarkeit der Drehimpulskomponenten $[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar\hat{L}_k$

Unterschied zur Klass. Mechanik, wo der Drehimpuls kontinuierlich jede Richtung und jeden Betrag annehmen kann!

Es gibt eine sog. „Richtungsentartung"

Zu jedem l kann m die Werte

$$\underbrace{-l,\ -l+1,\ \dots,\ +l}_{2l+1 \text{ Werte}} \quad \text{annehmen}$$

l ist $(2l+1)$-fach entartet!

Notation in Zukunft: $|\alpha,\beta\rangle \longrightarrow |l,m\rangle$

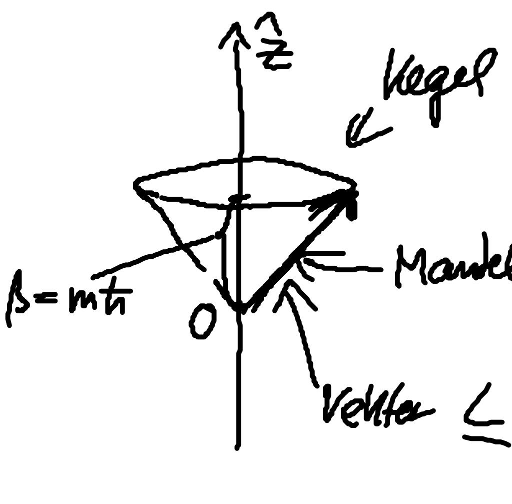
$$\hat{\underline{L}}^2 \underbrace{|l,m\rangle}_{\text{Eigenket}} = \hbar^2 l(l+1)\,|l,m\rangle$$

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

mit $m = -l, \dots, l$
und l ganz- oder halbzahlig!

Geometrische Veranschaulichung

„halb-klassisches Vektormodell"



Mantellinie $\hbar\sqrt{l(l+1)} = \underbrace{\sqrt{\alpha}}$!

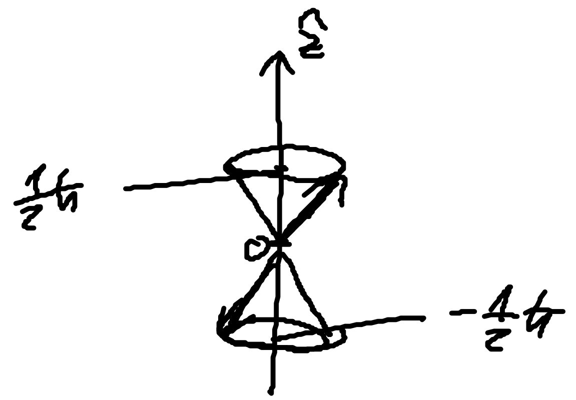
Betrag des Drehimpulses!

(da α der EW zu $\hat{\underline{L}}^2$ ist)

$\underline{L}$ präzediert um die z-Achse auf der Mantelfläche des Kegels

Präzession illustriert, daß nicht alle Komponenten von $\underline{L}$ gleichzeitig scharf meßbar sind

z.B. $l = \frac{1}{2}$ (relevant für den Spin des Elektrons)



$m = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

VI.3. Ortsdarstellung der Eigenzustände des Bahndrehimpulses

formaler Übergang

$\langle \underline{r} | l,m \rangle =: \psi_{lm}(\underline{r})$ (analog: $\langle \underline{r} | \psi \rangle = \psi(\underline{r})$)

$\langle \underline{r} | \hat{\underline{r}} | l,m \rangle = \underline{r}\, \psi_{lm}(\underline{r})$ Ortsoperator wirkt multiplikativ in der Ortsdarstellung

$\langle \underline{r} | \hat{\underline{p}} | l,m \rangle = \frac{\hbar}{i} \nabla \psi_{lm}(\underline{r})$ Impulsoperator $\rightarrow$ Gradient

Bahndrehimpuls: $\hat{\underline{L}} = \hat{\underline{r}} \times \hat{\underline{p}}$

$$\rightarrow \hat{\underline{r}} \times \frac{\hbar}{i} \nabla$$

$$\Rightarrow \hat{L}_x = \frac{\hbar}{i}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)$$

$$\hat{L}_y = \frac{\hbar}{i}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

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

Eigenfunktionen?

Startpunkt: $\hat{L}_z |l,m\rangle = m\hbar |l,m\rangle \qquad (m = -l, \dots, +l)$

$$\boxed{\hat{L}_z \, \psi_{lm}(\underline{r}) \overset{!}{=} m\hbar \, \psi_{lm}(\underline{r})} \quad (*)$$

Um aus (*) die Funktionen $\psi_{lm}(\underline{r})$ zu bestimmen, ist es einfacher, in Kugelkoordinaten zu arbeiten!
(r, ϑ, φ)

$$\underline{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r \sin\vartheta \cos\varphi \\ r \sin\vartheta \sin\varphi \\ r \cos\vartheta \end{pmatrix}$$

Transformation des Gradienten

$$\nabla \to \nabla \cdot \underline{e}_{y_i} \qquad \underline{e}_{y_i} = \frac{1}{\left|\frac{\partial r}{\partial y_i}\right|} \frac{\partial r}{\partial y_i}$$

Einheitsvektoren in Kugelkoordinaten $\underline{e}_r, \underline{e}_\vartheta, \underline{e}_\varphi$

$(y_i = r, \vartheta, \varphi)$

es ergibt sich:

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial r}, \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \vartheta}, \frac{1}{r\sin\varphi}\frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

Kombiniere mit $\underline{\underline{L}} = \left(\underline{r} \times \frac{\hbar}{i}\nabla \right)$

$$= \begin{pmatrix} r\sin\vartheta\cos\varphi \\ r\sin\vartheta\sin\varphi \\ r\cos\vartheta \end{pmatrix} \times \frac{\hbar}{i} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial r} \\ \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \vartheta} \\ \frac{1}{r\sin\varphi}\frac{\partial}{\partial\varphi} \end{pmatrix}$$

$$= \ldots\ldots = \begin{pmatrix} \frac{\hbar}{i}\left(-\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta} - \cot\vartheta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\ \frac{\hbar}{i}\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta} - \cot\vartheta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\ \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi} \end{pmatrix}$$