4.3 Ortsdarstellung des Bahndrehimpulses $\hat{\vec L}$

die Komponenten des Bahndrehimpulses $\hat{\vec L} = \hat{\vec r}\times\hat{\vec p}$ erfüllen die Drehimpulsalgebra → kennen also schon die möglichen EW von $\hat{\vec L}^2$, $\hat L_3$.

→ aber $\hat{\vec L}$ hat zusätzliche Eigenschaften, die ein allgemeines $\hat{\vec J}$ nicht hat; so gilt z.B. $\hat{\vec r}\cdot\hat{\vec L} = \underbrace{\hat r_i \hat r_j}_{\text{symm. in } i\leftrightarrow j}\, \hat p_k\, \underbrace{\varepsilon_{ijk}}_{\text{antisymm. in } i\leftrightarrow j} = 0$; gibt weitere Spektrum-Einschränkung

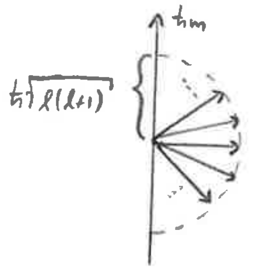
→ wollen hier die folgenden $\hat{\vec L}$-Eigenschaften zeigen:

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

$\hat L_3 |l,m\rangle = \hbar m\,|l,m\rangle$

$l \in \{0,1,2,\dots\}$ ganzzahlig!

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



(("klass. Bild": $\vec L$ ist Vektor der Länge $\hbar\sqrt{l(l+1)}$ mit Projektion auf z-Achse $\hbar m$))

(2) Der Teil $\frac{\hat{\vec p}^2}{2m}$ des Hamilton-Operators kann in Ortsdarstellung mit Kugelkoordinaten wie folgt geschrieben werden:

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

(3) $\hat{\vec L}^2$ und $\hat L_3$ operieren nur auf die Winkelkoordinaten. Die entsprechenden Wellenfkt'n $Y_{l,m}(\vartheta,\varphi) \equiv \langle \vartheta,\varphi | l,m\rangle$ sind orthonormiert, bilden eine vollständige Menge, und können explizit bestimmt werden. Sie heissen Kugelflächenfunktionen.

(zu 1): Ganzzahligkeit von l ist nicht trivial; viele Wege; hier [Münster 9.3.2]

def $\hat a_j \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(\hat r_j + i\hat p_j)$, $\hat A \equiv \frac{1}{\sqrt 2}(\hat a_1 + i\hat a_2)$, $\hat B \equiv \frac{1}{\sqrt 2}(\hat a_1 - i\hat a_2)$

(($\Rightarrow \hat a_j^+ = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(\hat r_j - i\hat p_j)$, $\hat A^+ = \frac{1}{\sqrt 2}(\hat a_1^+ - i\hat a_2^+)$, $\hat B^+ = \frac{1}{\sqrt 2}(\hat a_1^+ + i\hat a_2^+)$))

ausgehend von $[\hat r_j,\hat r_k] = 0 = [\hat p_j,\hat p_k]$, $[\hat r_j,\hat p_k] = i\hbar\,\delta_{jk}$

findet man $[\hat a_1,\hat a_1^+] = 1 = [\hat a_2,\hat a_2^+]$, Rest $= 0$

und daraus $[\hat A,\hat A^+] = 1 = [\hat B,\hat B^+]$, Rest $= 0$

→ Algebra wie zwei unabhängige harmon. Oszillatoren!

damit wird $\hat L_3 = \hat r_1 \hat p_2 - \hat r_2 \hat p_1$

$$= \sqrt{\tfrac{\hbar}{2}}\,(\hat a_1 + \hat a_1^+)\,\frac{1}{i}\sqrt{\tfrac{\hbar}{2}}\,(\hat a_2 - \hat a_2^+) \;-\; (2\leftrightarrow 1)$$

$$= \frac{\hbar}{2i}\Big(\cancel{\hat a_1 \hat a_2} - \hat a_1 \hat a_2^+ + \hat a_1^+ \hat a_2 - \cancel{\hat a_1^+ \hat a_2^+} - \cancel{\hat a_2 \hat a_1} + \hat a_2 \hat a_1^+ - \hat a_2^+ \hat a_1 + \cancel{\hat a_2^+ \hat a_1^+}\Big)$$

$$= \frac{\hbar}{i}\left(\hat a_1^+ \hat a_2 - \hat a_1 \hat a_2^+\right)$$

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

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

$$\Rightarrow \quad \hbar\left(\underbrace{\hat B^+ \hat B}_{} - \underbrace{\hat A^+ \hat A}_{}\right) = -i\hbar\left(\hat a_1^+ \hat a_2 - \hat a_1 \hat a_2^+\right) = \hat L_3$$

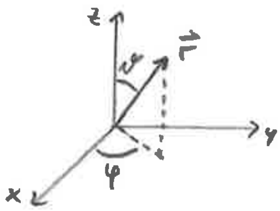
EW ganzzahlig ($\hat = \hat N$ Lsm h.o.; s.S. 42)

$\Rightarrow$ $\hat L_3$ - EW auch ganzzahlig! ■

(zu 2): Erinnerung: Kugelkoordinaten

$\vec r = (r\sin\vartheta\cos\varphi,\; r\sin\vartheta\sin\varphi,\; r\cos\vartheta)$

$\vec\nabla = \vec e_r\,\partial_r + \vec e_\vartheta\,\frac{1}{r}\,\partial_\vartheta + \vec e_\varphi\,\frac{1}{r\sin\vartheta}\,\partial_\varphi$



in Ortsdarstellung: $\langle \vec r\,|\hat{\vec p}\,|\vec r\,'\rangle = -i\hbar\,\vec\nabla\,\delta^{(3)}(\vec r - \vec r\,')$

und $\hat{\vec L} = -i\hbar\,\vec r \times \vec\nabla$, mit (kartesischen) Komponenten (s. Aufgabe 29)

$$\hat L_1 = -i\hbar\left(-\sin\varphi\,\partial_\vartheta - \cos\varphi\cot\vartheta\,\partial_\varphi\right)$$
$$\hat L_2 = -i\hbar\left(\cos\varphi\,\partial_\vartheta - \sin\varphi\cot\vartheta\,\partial_\varphi\right)$$
$$\hat L_3 = -i\hbar\left(\partial_\varphi\right)$$

daraus folgt für

$s \equiv \sin(\varphi)$
$c \equiv \cos(\varphi)$
$\mathcal{S} \equiv \sin(\vartheta)$
$\mathcal{C} \equiv \cos(\vartheta)$

$$\hat{\vec L}^2 = -\hbar^2\Big\{\left(s\,\partial_\vartheta + c\,\tfrac{\mathcal C}{\mathcal S}\,\partial_\varphi\right)\left(s\,\partial_\vartheta + c\,\tfrac{\mathcal C}{\mathcal S}\,\partial_\varphi\right) + \left(c\,\partial_\vartheta - s\,\tfrac{\mathcal C}{\mathcal S}\,\partial_\varphi\right)\left(c\,\partial_\vartheta - s\,\tfrac{\mathcal C}{\mathcal S}\,\partial_\varphi\right) + \partial_\varphi^2\Big\}$$

$$= -\hbar^2\Big\{s^2\partial_\vartheta^2 + sc\,\cancel{\partial_\vartheta\tfrac{\mathcal C}{\mathcal S}}\,\partial_\varphi + c\,\tfrac{\mathcal C}{\mathcal S}\,\partial_\varphi\, s\,\partial_\vartheta + c\,\tfrac{\mathcal C^2}{\mathcal S^2}\,\partial_\varphi\, c\,\partial_\varphi + c^2\partial_\vartheta^2 - cs\,\cancel{\partial_\vartheta\tfrac{\mathcal C}{\mathcal S}}\,\partial_\varphi - s\,\tfrac{\mathcal C}{\mathcal S}\,\partial_\varphi\, c\,\partial_\vartheta + s\,\tfrac{\mathcal C^2}{\mathcal S^2}\,\partial_\varphi\, s\,\partial_\varphi + \partial_\varphi^2\Big\}$$

$$= -\hbar^2\Big\{\partial_\vartheta^2 + \tfrac{\mathcal C}{\mathcal S}\,\partial_\vartheta + \tfrac{\mathcal C^2}{\mathcal S^2}\,\partial_\varphi^2 + \partial_\varphi^2\Big\}$$

$$= -\hbar^2\Big\{\frac{1}{\sin(\vartheta)}\,\partial_\vartheta\,\sin(\vartheta)\,\partial_\vartheta + \frac{1}{\sin^2(\vartheta)}\,\partial_\varphi^2\Big\}$$

und wegen (als Übg, oder z.B. EDTP)

$$\vec{\nabla}^2 = \partial_r^2 + \frac{2}{r}\partial_r + \underbrace{\frac{1}{r^2}\left\{\frac{1}{\sin(\vartheta)}\partial_\vartheta \sin(\vartheta)\partial_\vartheta + \frac{1}{\sin^2(\vartheta)}\partial_\varphi^2\right\}}_{= -\frac{1}{\hbar^2}\hat{\vec{L}}^2}$$

gilt insgesamt

$$\Rightarrow \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\partial_r^2 + \frac{2}{r}\partial_r\right) + \frac{1}{2mr^2}\hat{\vec{L}}^2$$

zu (3):

- Orthonormierung der Eigenzustände:
  brauche Integralmaß in Kugelkoord.

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

- Vollständigkeit: kann jede Fkt $f(\vartheta,\varphi)$ darstellen als $\sum$ coeff. · Basis

$$f(\vartheta,\varphi) = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} a_{lm}\, Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$$

$$\text{mit} \quad a_{lm} = \int_0^\pi d\vartheta \sin(\vartheta)\int_0^{2\pi} d\varphi \; Y_{lm}^*(\vartheta,\varphi)\, f(\vartheta,\varphi)$$

- Konstruktion: benutze die Leiteroperatoren

$$\hat{L}_\pm = \hat{L}_1 \pm i\hat{L}_2 = \hbar\left\{(i\sin(\varphi) \pm \cos(\varphi))\partial_\vartheta + i(\cos(\varphi) \pm i\sin(\varphi))\frac{\cos(\vartheta)}{\sin(\vartheta)}\partial_\varphi\right\}$$

$$= \hbar\, e^{\pm i\varphi}\left\{\pm\partial_\vartheta + i\frac{\cos(\vartheta)}{\sin(\vartheta)}\partial_\varphi\right\}$$

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

damit bekommt man also

- $\hat{L}_3 |l,m\rangle = \hbar m |l,m\rangle \Rightarrow \partial_\varphi Y_{lm}(\vartheta,\varphi) = im\, Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$

$$\Rightarrow Y_{lm}(\vartheta,\varphi) = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}} F_{lm}(\vartheta)$$

- $\hat{L}_+ |l,l\rangle = 0 \Rightarrow \hbar e^{i\varphi}\left\{\partial_\vartheta + i\frac{\cos(\vartheta)}{\sin(\vartheta)}\underbrace{\partial_\varphi}_{\to il}\right\}\frac{e^{il\varphi}}{\sqrt{2\pi}} F_{ll}(\vartheta) = 0$

$$\Leftrightarrow \left\{\partial_\vartheta - l\frac{\cos(\vartheta)}{\sin(\vartheta)}\right\} F_{ll}(\vartheta) = 0$$

$$\Rightarrow F_{ll}(\vartheta) = K_l \cdot (\sin\vartheta)^l$$

((Bestimmung der Konstanten K_l durch $\int_0^\pi d\vartheta \sin(\vartheta)\,|F_{ll}(\vartheta)|^2 = 1$))

- $\langle\vartheta,\varphi|l,l-1\rangle \overset{(5.5.48)}{=} \frac{1}{C_-(l,l)}\hat{L}_-\langle\vartheta,\varphi|l,l\rangle$ usw.

((→ Übung, A 27b))