<u>Notation</u>: $\hat{\vec{J}}^2 |\lambda, m\rangle = \hbar^2 \lambda |\lambda, m\rangle$ Eigenzustand zu $\hat{\vec{J}}^2$ mit Eigenwert $\hbar^2\lambda \in \mathbb{R}$

$\hat{J}_3 |\lambda, m\rangle = \hbar m |\lambda, m\rangle$ Eigenzustand mit Eigenwert $\hbar m \in \mathbb{R}$

mit <u>Normierung</u> $\boxed{\langle \lambda, m | \lambda', m'\rangle = \delta_{\lambda,\lambda'}\, \delta_{m,m'}}$

dies sind die Quantenzahlen der Basiszustände

<u>Def</u> $\boxed{\hat{J}_+ = \hat{J}_1 + i\hat{J}_2}$, $\boxed{\hat{J}_- = \hat{J}_1 - i\hat{J}_2}$; es gilt $\hat{J}_+^\dagger = \hat{J}_-$

<u>Vertauschungsrelationen</u>:

(i) $[\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_\pm] = \hat{0}$ (wegen $[\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_i] = \hat{0}$ $\forall i = 1,2,3$ s.o.)

(ii) $\boxed{[\hat{J}_3, \hat{J}_\pm]} = [\hat{J}_3, \hat{J}_1 \pm i\hat{J}_2] = [\hat{J}_3, \hat{J}_1] \pm i [\hat{J}_3, \hat{J}_2]$
$= i\hbar \hat{J}_2 \pm i(-i\hbar \hat{J}_1) = \hbar(i\hat{J}_2 \pm \hat{J}_1) = \pm\hbar \hat{J}_\pm$

(iii) $\boxed{[\hat{J}_+, \hat{J}_-]} = [\hat{J}_1 + i\hat{J}_2, \hat{J}_1 - i\hat{J}_2] = -i \underbrace{[\hat{J}_1, \hat{J}_2]}_{i\hbar \hat{J}_3} + i \underbrace{[\hat{J}_2, \hat{J}_1]}_{-i\hbar \hat{J}_3}$
$\boxed{= 2\hbar \hat{J}_3}$

(iv) $\hat{\vec{J}}^2 = \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 + \hat{J}_3^2 = (\hat{J}_1 - i\hat{J}_2)(\hat{J}_1 + i\hat{J}_2) - i\underbrace{[\hat{J}_1, \hat{J}_2]}_{i\hbar \hat{J}_3} + \hat{J}_3^2$
$\boxed{= \hat{J}_- \hat{J}_+ + \hbar \hat{J}_3 + \hat{J}_3^2 = \hat{J}_+ \hat{J}_- - \hbar \hat{J}_3 + \hat{J}_3^2}$

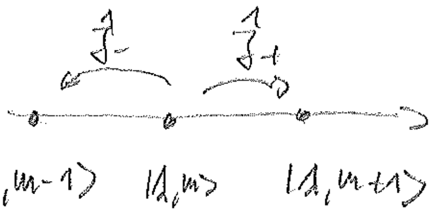
<u>Konsequenzen</u>:

(a) $\hat{\vec{J}}^2 (\hat{J}_\pm |\lambda, m\rangle) \overset{(i)}{=} \hbar^2 \lambda\, \hat{J}_\pm |\lambda, m\rangle$ d.h. $\hat{J}_\pm |\lambda, m\rangle$ sind Eigenzustände von $\hat{\vec{J}}^2$ zum selben Eigenwert!

(b) $\hat{J}_3 (\hat{J}_\pm |\lambda, m\rangle) = (\hat{J}_\pm \hat{J}_3 + [\hat{J}_3, \hat{J}_\pm]) |\lambda, m\rangle$
$= (\hat{J}_\pm m \pm \hat{J}_\pm) |\lambda, m\rangle = \hbar(m \pm 1)\, \hat{J}_\pm |\lambda, m\rangle$, d.h.

diese sind auch Eigenzustände von $\hat{J}_3$ mit <u>Eigenwerten $\hbar(m \pm 1)$</u>.

Also wirken $\hat{J}_+$ und $\hat{J}_-$ wie Auf- und Absteigeoperatoren bzgl. m.



(c) $$0 \le \| \hat{J}_\pm |\lambda, m\rangle \|^2 = \langle \lambda, m | \hat{J}_\pm^\dagger \hat{J}_\pm | \lambda, m\rangle = \langle \lambda, m | \hat{J}_\mp \hat{J}_\pm | \lambda, m \rangle$$

$$\overset{(iv)}{=} \langle \lambda, m | (\hat{\vec{J}}^2 - \hat{J}_3^2 \mp \hbar \hat{J}_3) | \lambda, m \rangle = \langle \lambda, m | (\hbar^2 \lambda - \hbar^2 m^2 \mp \hbar \hbar m) | \lambda, m \rangle$$

$$= \hbar^2 (\lambda - m^2 \mp m) \underbrace{\langle \lambda, m | \lambda, m \rangle}_{=1}$$

d.h. $\boxed{m^2 \pm m \le \lambda}$. Welchen Wertebereich nehmen diese an?

- Für $m > 0$ ist $m^2 - m < \underline{m^2 + m \le \lambda}$ die stärkere Bedingung

und f. $m < 0$ ist $m^2 + m < \underline{m^2 - m \le \lambda}$

d.h. zusammen ($|m| = \begin{cases} m & m > 0 \\ -m & m < 0 \end{cases}$) $\boxed{|m|(|m|+1) \le \lambda}$ (*) also ist der Bereich der möglichen m zu gegebenem λ beschränkt. Es sei $m_{max} = j$ der maximal mögliche Wert von m zu gegebenem λ

$\Rightarrow \boxed{\hat{J}_+ |\lambda, j\rangle = 0}$ muß gelten, da wir sonst einen Eigenwert $\hbar(m_{max}+1)$ erzeugen könnten, dieser würde dann diese Schranke (*) verletzen!

$\Rightarrow 0 = \| \hat{J}_+ |\lambda, j\rangle \|^2 = \hbar^2 (\lambda - j^2 - j) \Rightarrow \boxed{\lambda = j(j+1)}$

* aus Symmetriegründen gilt damit sofort $\boxed{\hat{J}_- |\lambda, -j\rangle = 0}$

da $\| \hat{J}_- |\lambda, -j\rangle \|^2 = \hbar^2 (\lambda - (-j)^2 + (-j)) = \hbar^2 (\lambda - j^2 - j) = 0$

$\Rightarrow$ die möglichen Werte von m zu gegebenem $\boxed{\lambda = j(j+1)}$

sind $\boxed{m = -j, -j+1, \dots, j-1, j}$. Dies sind $2j+1$ Werte, und damit wir durch $2j$-fache Addition von $+1$ zu $-j$ den Wert j erhalten, muß $2j$ ganzzahlig sein: $\underline{2j = \mathbb{N}}$, d.h. $\boxed{j = \{0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots\} \text{ mit } m = \{-j, -j+1, \dots, j-1, j\}}$

<u>Bsp</u>: $j = 0 \Rightarrow m = 0$

$j = \frac{1}{2} \Rightarrow m = -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$

$j = 1 \Rightarrow m = -1, 0, +1$

$j = \frac{3}{2} \Rightarrow m = -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, +\frac{3}{2}$ usw.

<u>Notationswechsel</u> $|\underbrace{j(j+1)}_{\hat{=}}, m\rangle \rightarrow \underline{|j, m\rangle}$ d.h.

<u>Fazit</u>: die gemeinsame Basis von $\hat{\vec{J}}^2$ und $\hat{J}_3$ ist gegeben durch die Zustände $|j,m\rangle$ mit Eigenwerten $\hat{\vec{J}}^2 |j,m\rangle = \hbar^2 (j+1) j \, |j,m\rangle$

$\hat{J}_3 |j,m\rangle = \hbar m \, |j,m\rangle$

wobei $\boxed{j \in \{0, \frac{1}{2}, 1, \dots\} \text{ und } m = \{-j, -j+1, \dots, j-1, j\}}$ annimmt.

<u>Normierung der Eigenzustände $|j,m\rangle$</u>: (vorgehen wie S. 75)

$\underline{\hat{J}_+ |j,m\rangle = C_+(j,m) \, |j, m+1\rangle}$, wobei $\langle j', m' | j, m\rangle = \delta_{j'j} \delta_{m'm}$ gelte

$\Rightarrow \langle j, m+1| \hat{J}_- = \langle j, m+1 | C_+^*(j,m)$ wegen $\hat{J}_+^\dagger = \hat{J}_-$

$\Rightarrow \langle j, m | \underbrace{\hat{J}_- \hat{J}_+}_{} | j, m\rangle = |C_+(j,m)|^2 \underbrace{\langle j, m+1 | j, m+1\rangle}_{=1}$

S. 86 (iv) $\hat{=} \hat{\vec{J}}^2 - \hbar \hat{J}_3 - \hat{J}_3^2$

$\Leftrightarrow \underline{|C_+(j,m)|^2} = \langle j, m | \left(\hbar^2 (j(j+1) - m - m^2)\right) | j, m\rangle$

$\quad \hookrightarrow \hbar^2 (j(j+1) - m(m+1)) = \hbar^2 (j^2 + j - m^2 - m) = \underline{\hbar^2 (j-m)(j+m+1)}$

Wir wählen $C_+(j,m)$ reell "Condon-Shortley-Phasenkonvention":

$\Rightarrow \boxed{C_+(j,m) = \hbar \sqrt{(j-m)(j+m-1)}}$

genauso erhalten wir $\hat{J}_- |j,m\rangle = C_-(j,m)\,|j,m-1\rangle$

$$\Rightarrow \langle j,m|\hat{J}_+\hat{J}_-|j,m\rangle = |C_-(j,m)|^2$$

$$= \langle j,m|\hat{\vec{J}}^2 + \hbar\hat{J}_3 - \hat{J}_3^2|j,m\rangle = \hbar^2(j(j+1)+m-m^2) = \hbar^2(j+m)(j-m+1)$$

$$\boxed{C_-(j,m) = \hbar\sqrt{(j+m)(j-m+1)}}$$

* Hiermit können alle Matrixelemente von $\hat{J}_3$, $\hat{J}_1 = \frac{1}{2}(\hat{J}_+ + \hat{J}_-)$ und $\hat{J}_2 = \frac{i}{2}(\hat{J}_- - \hat{J}_+)$ sowie deren Quadrate berechnet werden:

- $\langle j',m'|\hat{J}_3|j,m\rangle = \hbar m\,\delta_{j'j}\,\delta_{m'm}$ da $\hat{J}_3$ weder j noch m ändert

- $$\begin{aligned}\langle j',m'|\hat{J}_1|j,m\rangle &= \tfrac{1}{2}\langle j',m'|(\hat{J}_+ + \hat{J}_-)|j,m\rangle \\ &= \tfrac{1}{2}\langle j',m'|\big(C_+(j,m)|j,m+1\rangle + C_-(j,m)|j,m-1\rangle\big) \\ &= \tfrac{1}{2}\delta_{j'j}\,\delta_{m',m+1}\,C_+(j,m) + \tfrac{1}{2}\delta_{j'j}\,C_-(j,m)\,\delta_{m',m-1} \\ &= \tfrac{\hbar}{2}\delta_{j'j}\Big(\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\,\delta_{m',m+1} + \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\,\delta_{m',m-1}\Big)\end{aligned}$$

- $$\begin{aligned}\langle j',m'|\hat{J}_2|j,m\rangle &= \tfrac{i}{2}\langle j',m'|(\hat{J}_- - \hat{J}_+)|j,m\rangle \\ &= \tfrac{i}{2}\langle j',m'|\big(C_-(j,m)|j,m-1\rangle - C_+(j,m)|j,m+1\rangle\big) \\ &= \tfrac{i\hbar}{2}\delta_{j'j}\Big(\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\,\delta_{m',m-1} - \sqrt{(j-m)(j+m+1)}\,\delta_{m',m+1}\Big)\end{aligned}$$

$\hat{J}_1$ und $\hat{J}_2$ verändern die zweite Quantenzahl m, aber nicht die ("Haupt"-) Quantenzahl j.

5.3. Die Ortsdarstellung des Bahndrehimpulses [Münster 9.2-4, Fließbach IV 23]

- die Komponenten $\hat{L}_j$ des Bahndrehimpulses $\hat{\vec{L}} = \vec{r} \times \vec{p}$ erfüllen die SO(3) Bahndrehimpulsalgebra. Wir kennen aus dem vorherigen Kapitel die zu $\hat{\vec{L}}^2$ und $\hat{L}_3$ gehörenden möglichen Eigenwerte und Eigenschaften der gemeinsamen ONB.
- Zusätzlich hat $\hat{\vec{L}}$ besondere Eigenschaften, die ein allgemeines $\hat{\vec{J}}$, daß nur die SO(3) erfüllt, i.A. nicht hat:

• $\hat{\vec{r}} \cdot \hat{\vec{L}} = \hat{r}_i \, \varepsilon_{ijk} \, \hat{r}_j \, \hat{p}_k = \hat{0}$, da $[\hat{r}_i, \hat{r}_j] = 0$

vertauschen und damit $\hat{r}_i \hat{r}_j = \hat{r}_j \hat{r}_i$ symmetrisch, ε_{ijk} aber antisymmetrisch in i und j: $\Rightarrow \hat{\vec{r}} \cdot \hat{\vec{L}} = \underset{i'}{\hat{r}_j} \, \underset{j'}{\hat{r}_i} \, \underset{j'i'}{\varepsilon_{jik}} \hat{p}_k = - \hat{r}_i \hat{r}_j \varepsilon_{ijk} \hat{p}_k$

genauso gilt $\hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{p}} = \hat{0}$ (und $\hat{\vec{L}} \cdot \vec{r} = \hat{0} = \hat{\vec{p}} \cdot \hat{\vec{L}}$, wieso?)

• wir kennen die VR von $\hat{r}_i$ und $\hat{p}_j$ und damit von $\hat{L}_i$ mit diesen.

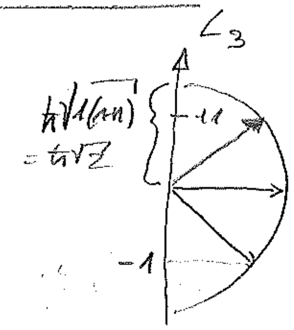
* Wir beweisen nun die folgenden 3 Eigenschaften von $\hat{\vec{L}}$:

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

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

mit $m \in \{-l, -l+1, \ldots, l-1, l\}$ und $l = 0, 1, 2, \ldots$

d.h. z.z. ist, daß l ganz- und nicht halbzahlig ist



L_3 - Komponenten des Vektors $\vec{L}$, mit „Länge" $|\vec{L}| = \hbar\sqrt{l(l+1)}$

ii) der kinetische Anteil $\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}$ des Hamiltonoperators $\hat{H}$ hat in Ortsdarstellung in Kugelkoordinaten folgende

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

wobei $\hat{\vec{p}}^2 = -\hbar^2 \Delta$, d.h. Aufspaltung in Radial- und Winkel-Anteil des Laplace-Operators in 3D. $r^2 = x_i x_i$