5.3. Die Ortsdarstellung des Bahndrehimpulses [Münster 9.2-4, Fließbach IV 2-3]

– die Komponenten $\hat{L}_j$ des Bahndrehimpulses $\boxed{\hat{\vec{L}} = \vec{r} \times \vec{p}}$ 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 $\hat{L}$ besondere Eigenschaften, die ein allgemeines $\hat{\vec{J}}$, daß nur die SO(3) erfüllt, i.A. nicht hat:

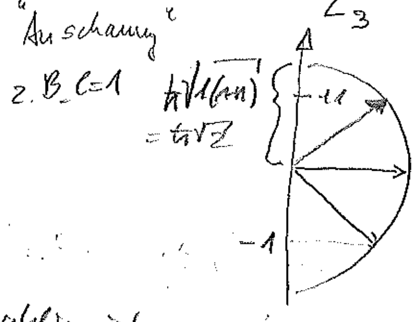
- $\hat{\vec{r}} \cdot \hat{\vec{L}} = \hat{r}_i \, \varepsilon_{ijk} \, \hat{r}_j \hat{p}_k = \hat{0}$, da $[\hat{r}_i, \hat{r}_j] = 0$ vertauschen und damit $\hat{r}_i \hat{r}_j = \hat{r}_j \hat{r}_i$ symmetrisch, ε_{ijk} aber antisymmetrisch in i, j : $\Rightarrow \hat{\vec{r}} \cdot \hat{\vec{L}} = \hat{r}_j \hat{r}_i \, \varepsilon_{ijk} \hat{p}_k = - \hat{r}_{i'} \hat{r}_{j'} \, \varepsilon_{i'j'k} \hat{p}_k$ ($i' = j$, $j' = i$)

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

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

L_3 - Komponente 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 Form:

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

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

iii) $\hat{\vec{L}}^2$ und $\hat{L}_3$ wirken nur auf die Winkelkoordinaten (θ, φ) des Systems in Kugelkoordinaten (r, θ, φ).

Der entsprechende Anteil der Wellenfunktion in Orts darstellung $\langle \theta, \varphi | l, m \rangle = Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ heißt Kugelflächenfunktion.

Diese sind orthonormiert und können explizit bestimmt werden.

zu i) Beweis, daß l ganzzahlig (s. Münster, Kapitel 9.3.2) Idee: benutze HO!

$$\text{Def.} \left| \begin{array}{l|l} \hat{a}_j \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(\hat{x}_j + i\hat{p}_j) & \Rightarrow \hat{a}_j^+ = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(\hat{x}_j - i\hat{p}_j) \quad \text{für } j = 1,2 \\ \hat{A} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}_1 + i\hat{a}_2) & \Rightarrow \hat{A}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}_1^+ - i\hat{a}_2^+) \\ \hat{B} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}_1 - i\hat{a}_2) & \Rightarrow \hat{B}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}_1^+ + i\hat{a}_2^+) \end{array} \right.$$

aufgrund der kanonischen Vertauschungsrelationen (VR)

$[\hat{x}_j, \hat{x}_k] = \hat{0} = [\hat{p}_j, \hat{p}_k]$, $[\hat{x}_j, \hat{p}_k] = i\hbar\delta_{j,k}$ gelten folgende

$$\text{VR} \quad [\hat{a}_1, \hat{a}_2] = \hat{0} = [\hat{a}_1^+, \hat{a}_2^+], \quad [\hat{a}_1, \hat{a}_2^+] = \hat{0} = [\hat{a}_1^+, \hat{a}_2]$$

und
$$[\hat{a}_1, \hat{a}_1^+] = \frac{1}{2\hbar}\left((\hat{x}_1 + i\hat{p}_1)(\hat{x}_1 - i\hat{p}_1) - (\hat{x}_1 - i\hat{p}_1)(\hat{x}_1 + i\hat{p}_1)\right)$$
$$= \frac{1}{2\hbar}\left(i[\hat{p}_1, \hat{x}_1] \cdot 2\right) = \hat{1}$$

dito $[\hat{a}_2, \hat{a}_2^+] = \hat{1}$. Umgekehrt können wir $\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{p}_1, \hat{p}_2$ durch die $\hat{a}^{(+)}_j$ ausdrücken.

hieraus folgt: $[\hat{A}, \hat{B}] = \frac{1}{2}[(\hat{a}_1 + i\hat{a}_2), (\hat{a}_1 - i\hat{a}_2)] = \hat{0}$, dito $[\hat{A}^+, \hat{B}^+] = \hat{0}$

und genauso $[\hat{A}, \hat{A}^+] = \frac{1}{2}[(\hat{a}_1 + i\hat{a}_2), (\hat{a}_1^+ - i\hat{a}_2^+)] = \hat{1}$,

$[\hat{B}, \hat{B}^+] = \quad - \quad + \quad = \hat{1}$

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

$[\hat{B}, \hat{A}^+] = \quad - \quad - \quad - \quad = \hat{0}$

d.h. $\hat a_1$ und $\hat a_2$ sowie $\hat A$ und $\hat B$ wirken wie zwei unabhängige, 1D harmonische Oszillatoren, da sie vertauschen haben sie eine gemeinsame Eigenbasis.

Nun gilt $\hat L_3 = (\hat{\vec X}\times\hat{\vec P})_3 = \varepsilon_{3kl}\, x_k p_l = \hat X_1 \hat P_2 - \hat X_2 \hat P_1$

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

$$= \frac{\hbar}{2i}\left[\hat a_1\hat a_2 - \hat a_1\hat a_2^+ + \hat a_1^+\hat a_2 - \hat a_1^+\hat a_2^+ - \hat a_2\hat a_1 + \hat a_2\hat a_1^+ - \hat a_2^+\hat a_1 + \hat a_2^+\hat a_1^+\right]$$

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

andererseits gilt $\hat A^+\hat A = \frac12(\hat a_1^+ - i\hat a_2^+)(\hat a_1 + i\hat a_2) = \frac12(\hat a_1^+\hat a_1 + i\hat a_1^+\hat a_2 - i\hat a_2^+\hat a_1 + \hat a_2^+\hat a_2)$

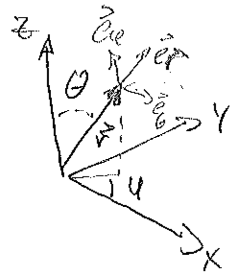
und $\hat B^+\hat B = \frac12(\hat a_1^+ + i\hat a_2^+)(\hat a_1 - i\hat a_2) = \frac12(\hat a_1^+\hat a_1 - i\hat a_1^+\hat a_2 + i\hat a_2^+\hat a_1 + \hat a_2^+\hat a_2)$

$$\Rightarrow \boxed{\hat L_3 = \hbar(\hat B^+\hat B - \hat A^+\hat A)} = \frac{\hbar}{2}(-i\,\hat a_1^+\hat a_2\cdot 2 + i\,\hat a_2^+\hat a_1\cdot 2) \quad ✓ \text{ s.o.}$$

da $\hat A$ und $\hat B$ 1D harmonische Oszillatoren sind haben $\hat B^+\hat B$ und $\hat A^+\hat A$ ganzzahlige Eigenwerte (!) ⇒ die Eigenwerte m von $\hat L_3$ sind ganzzahlig ⇒ wegen $m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$ müssen auch die „Eigenwerte" l von $\hat{\vec L}^2$ ganzzahlig sein. □

zu ii) Beweis für die Ortsdarstellung von $\hat{\vec p}^2$ in Kugelkoordinaten

Kugelkoord.:



$\varphi \in [0, 2\pi]$

$\theta \in [0, \pi]$

wobei $\vec r = (x, y, z)$
$= (r_1, r_2, r_3)$

$r^2 = x^2 + y^2 + z^2 = \vec r^2$

⇒ es gilt $\vec r = (r\sin\theta\cos\varphi,\ r\sin\theta\sin\varphi,\ r\cos\theta)$

und $\nabla_{\vec r} = \vec e_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec e_\theta \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \vec e_\varphi \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}$

mit $\vec e_r = \frac{\vec r}{|\vec r|}$

- in Ortsdarstellung gilt $\hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla_{\vec{r}}$, eingesetzt in $\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}}\times\hat{\vec{p}} = -i\hbar\,\vec{r}\times\nabla_{\vec{r}}$

ergibt (s. Ü11):

$$\boxed{\begin{aligned}\hat{L}_1 &= -i\hbar\left(-\sin\varphi\,\frac{\partial}{\partial\theta} - \cos\varphi\cot\theta\,\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\\ \hat{L}_2 &= -i\hbar\left(\cos\varphi\,\frac{\partial}{\partial\theta} - \sin\varphi\cot\theta\,\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\\ \hat{L}_3 &= \qquad\qquad -i\hbar\,\frac{\partial}{\partial\varphi}\end{aligned}}$$

* die Behauptung war, daß $\hat{\vec{L}}^2$ den Winkelanteil des Laplace-Operators in $\hat{\vec{p}}^2 = -\hbar^2\Delta_{\vec{r}}$ beschreibt $\Rightarrow$ wir bestimmen $\hat{\vec{L}}^2$:

$$\hat{\vec{L}}^2 = \hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2 + \hat{L}_3^2 \qquad \text{(Ableitungen wirken auf Alles was rechts steht, auch von } \hat{\vec{L}}^2\text{)}$$

$$= -\hbar^2\Big\{(-\sin\varphi\,\partial_\theta - \cos\varphi\cot\theta\,\partial_\varphi)(-\sin\varphi\,\partial_\theta - \cos\varphi\cot\theta\,\partial_\varphi)$$
$$+(\cos\varphi\,\partial_\theta - \sin\varphi\cot\theta\,\partial_\varphi)(\cos\varphi\,\partial_\theta - \sin\varphi\cot\theta\,\partial_\varphi) + \partial_\varphi^2\Big\}$$

$$= -\hbar^2\Big\{\sin^2\varphi\,\partial_\theta^2 + \sin\varphi\cos\varphi\big((\partial_\theta\cot\theta)\,\partial_\varphi + \cot\theta\,\partial_\theta\partial_\varphi\big)$$
$$+\cos\varphi\cot\theta\big((\partial_\varphi\sin\varphi)\partial_\theta + \sin\varphi\,\partial_\varphi\partial_\theta\big) + \cos\varphi\cot^2\theta\big((\partial_\varphi\cos\varphi)\,\partial_\varphi + \cos\varphi\,\partial_\varphi^2\big)$$
$$+\cos^2\varphi\,\partial_\theta^2 - \cos\varphi\sin\varphi\big((\partial_\theta\cot\theta)\partial_\varphi + \cot\theta\,\partial_\theta\partial_\varphi\big)$$
$$-\sin\varphi\cot\theta\big((\partial_\varphi\cos\varphi)\,\partial_\theta + \cos\varphi\,\partial_\varphi\partial_\theta\big) + \sin\varphi\cot^2\theta\big((\partial_\varphi\sin\varphi)\partial_\varphi + \sin\varphi\,\partial_\varphi^2\big)$$
$$+\partial_\varphi^2\Big\}$$

$\cos^2\varphi + \sin^2\varphi = 1$

$$= -\hbar^2\left\{\partial_\theta^2 + \partial_\varphi^2 + \cot^2\theta\,\partial_\varphi^2 + \cot\theta\,\partial_\theta\right\}, \qquad 1+\cot^2\theta = \frac{\sin^2\theta + \cos^2\theta}{\sin^2\theta}$$

$$= -\hbar^2\left\{\frac{1}{\sin\theta}\,\partial_\theta(\sin\theta)\,\partial_\theta + \frac{1}{\sin^2\theta}\,\partial_\varphi^2\right\}$$

mit (RuP)

$$\nabla_{\vec{r}}^2 = \boxed{\Delta_{\vec{r}} = \underbrace{\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}}_{\text{Radialteil}} + \underbrace{\frac{1}{r^2}\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left[\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right] + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\}}_{\text{Winkel-Anteil}}}$$

Laplace-Op in Kugelkoordinaten, gilt also

$$\frac{1}{2m}\hat{\vec{p}}^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\vec{r}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{2mr^2}\hat{\vec{L}}^2 \quad \text{in Ortsdarstellung}$$