– 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 $\hat{\vec{L}}^2$:

$\hat{\vec{L}}^2 = \hat L_1^2 + \hat L_2^2 + \hat L_3^2$ (Ableitungen wirken auf Alles was rechts steht, auch von $\hat{\vec L}^2$) $\to$ Produktregel

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

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

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

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

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

mit (Rdp) $\nabla_{\vec r}^2 = \boxed{\Delta_{\vec r} = \underbrace{\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}}_{\text{Radialteil}} + \frac{1}{r^2}\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left[\sin\theta\,\frac{\partial}{\partial\theta}\right] + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\}}$

Laplace-Op in Kugelkoordinaten, gilt also

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

eingesetzt in den Erwartungswert erhalten wir analog zu

$$\langle \vec{r} | \hat{\vec{p}} | \vec{r}' \rangle = -i\hbar \nabla_{\vec{r}} \, \delta^{(3)}(\vec{r}-\vec{r}') \qquad \text{(s. S. 54 in 1D)}$$

erhalten wir für $\langle \vec{r} | \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} | \vec{r}' \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \langle \vec{r} | \Delta_{\vec{r}} | \vec{r}' \rangle$ die Behauptung.

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

Vergleich zum klassischen Vektorquadrat:

$$\vec{L}^2 = (\vec{r} \times \vec{p})^2 = (\vec{r} \times \vec{p}) \cdot (\vec{r} \times \vec{p})$$

(nach Identität für doppeltes Kreuz-Produkt, oder für $\varepsilon\varepsilon$):

$$= \varepsilon_{ijk} r_j p_k \, \varepsilon_{ilm} r_l p_m = (\delta_{jl}\delta_{km} - \delta_{jm}\delta_{kl}) r_j p_k r_l p_m$$

$$= r_j p_k r_j p_k - r_j p_k r_k p_j = (\vec{r}^2)(\vec{p}^2) - (\vec{r} \cdot \vec{p})^2$$

da hier die Reihenfolge keine Rolle spielt. Bringe $\vec{p}^2$ auf 1 Seite,

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

$\vec{e}_r = \frac{\vec{r}}{r}$

– wenn wir das hier $\vec{p} = -i\hbar \nabla_{\vec{r}}$ einsetzen würden und dann nur naiv

nur $\vec{e}_r \cdot \nabla_{\vec{r}} = \frac{\partial}{\partial r}$ behalten würden, hätten wir den Mischterm $\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}$
(den Radialteil von $\hat{\vec{p}}$)

verloren.

zu iii) wir haben bereits gezeigt, daß $\hat{\vec{L}}^2$ und $\hat{L}_3$ nur auf den

Winkelanteil θ und φ in Kugelkoordinaten (r, θ, φ) wirken.

Für die freie, 3D Schrödinger separieren also Radial und Winkelkoordinaten,

$\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} \psi(\vec{r}) = E\,\psi(\vec{r})$ mit $\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} \leq 0$, und wir können einen Separations-

Ansatz machen: $\boxed{\psi(\vec{r}) = f(r)\, Y_{lm}(\theta, \varphi)}$, wobei der Winkelanteil

von den Eigenwerten l und m von $\hat{\vec{L}}^2$ und $\hat{L}_3$ abhängt in der gemeinsamen

Basis mit $\hat{H}$. (Für welche $V(\vec{r})$ dies auch gilt → Ü 10.3)

• Normierung: in 3D in Kugelkoordinaten gilt, dass

$$\int_{\mathbb{R}^3} dx\,dy\,dz = \int_0^\infty dr\, r^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin\theta \quad , \text{ um z.B. } \int dx\,dy\,dz\, |\psi(\vec r)|^2 = 1$$

zu bestimmen. Damit müssen die Kugelflächenfunktionen wie folgt

Normiert sein: $\psi(\vec r) = \langle \vec r | \psi \rangle = f(r)\, Y_{l,m}(\theta,\varphi)$

$$\boxed{\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin(\theta)\, Y^*_{l,m}(\theta,\varphi)\, Y_{l',m'}(\theta,\varphi) = \delta_{ll'}\,\delta_{m,m'}}$$

(aus $\delta_{l,l'}\delta_{m,m'} \langle l,m | l',m' \rangle = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin\theta \langle l,m | \theta,\varphi \rangle \langle \theta,\varphi | l',m' \rangle$)

• Vollständigkeit: die $Y_{l,m}(\theta,\varphi)$ bilden ein vollständiges Funktionen-System auf der Einheitskugel und demnach kann jede Funktion $f(\theta,\varphi)$ durch sie als Basis ausgedrückt werden:

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

, bzw durch die Projektion von oben (Orthogonalität) erhalten wir für die Entwicklungskoeffizienten

$$\boxed{a_{l,m} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin\theta\, Y^*_{l,m}(\theta,\varphi)\, f(\theta,\varphi)}$$

• Konstruktion der $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ = Kugelflächenfunktionen:

benutze analog zu $\hat{J}_\pm$ (s. S. 86) die Auf- und Absteigeoperatoren

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

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

da die $Y_{l,m}(\theta,\varphi)$ Eigenzustände zu $\hat{L}_3$ und $\hat{\vec{L}}^2$ in Ortsdarstellung sind,

$$\hat{\vec{L}}^2 Y_{l,m}(\theta,\varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{l,m}(\theta,\varphi) \,, \quad \hat{L}_3 Y_{l,m}(\theta,\varphi) = \hbar m\, Y_{l,m}(\theta,\varphi)$$

gilt $-i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi} Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = \hbar m Y_{\ell m} \Leftrightarrow$ $\boxed{\frac{\partial}{\partial\varphi} Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = i m\, Y_{\ell m}(\theta,\varphi)}$

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

des weiteren gilt:

$$\hat{L}_+ |\ell,\ell\rangle = 0 \Rightarrow 0 = (i\sin\varphi + \cos\varphi)\frac{\partial}{\partial\theta} Y_{\ell m}(\theta,\varphi) + i(\cos\varphi + i\sin\varphi)\cdot\cot\theta\, i\ell \frac{e^{i\ell\varphi}}{\sqrt{2\pi}} F_{\ell\ell}(\theta)$$

$: (\cos\varphi + i\sin\varphi)$ $\Leftrightarrow$ $\boxed{\frac{\partial}{\partial\theta} F_{\ell\ell}(\theta) = \ell \cot\theta\, F_{\ell\ell}(\theta)}$

mit Lösung $F_{\ell\ell}(\theta) = K_\ell (\sin\theta)^\ell$

* wie wir sehen erfüllt der φ-Anteil die gewöhnliche Orthogonalitätsbeziehung

$$\boxed{\delta_{\ell\ell'}\delta_{m,m'} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta \frac{e^{-im\varphi}}{\sqrt{2\pi}} F_{\ell m}(\theta) \frac{e^{+im'\varphi}}{\sqrt{2\pi}} F_{\ell' m'}(\theta)}$$

und für $\ell = m$ kann die Konstante k_ℓ aus $\int_0^{\pi} d\theta \sin\theta |K_\ell|^2 (\sin\theta)^{2\ell} = 1$ bestimmt werden.

→ die weiteren $Y_{\ell,m}(\theta,\varphi)$ zu $m = \ell-1, \ell-2$ usw. können durch Anwendung des Absteigeoperators gewonnen werden:

$$Y_{\ell,\ell-1}(\theta,\varphi) = \langle \theta,\varphi | \ell,\ell-1\rangle = \frac{1}{c(\ell,\ell)} \hat{L}_- \langle\theta,\varphi|\ell,\ell\rangle \quad \text{s. Üb 11}$$

* weitere explizite Ergebnisse werden in Ü 11 berechnet, siehe auch [Flossbach IV 23] für die allgemeine Lösung

$$\boxed{Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} \sqrt{\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}}\, P_\ell^m(\cos\theta)\, e^{im\varphi}}$$

wobei $P_\ell^m(x)$ die zugeordneten Legendre Polynome sind.

• Explizites Beispiel zu $\ell = 0, 1 \to$ Ü 11

5.4 Spin [Münster 15.1 – 15.3, Fließbach IV 37]

- Wie wir gesehen haben besitzt der Bahndrehimpuls $\hat{\vec{L}}$, der auf den (skalaren) Wellenfunktionen $\psi(\vec{r}) \in \mathbb{C}$ Drehungen im $\mathbb{R}^3$ bewirkt, immer Eigenwerte $\hbar^2 l(l+1)$ von $\hat{\vec{L}}^2$ mit ganzzahligen $l \in \mathbb{N}$. Damit durchläuft m die ungerade Anzahl $2l+1$ von Werten $-l, \dots, l$.
- Andererseits können allgem. Operatoren $\hat{\vec{J}}$, die die Drehimpulsalgebra erfüllen, auch halbzahlige Werte $j = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}$ usw. annehmen. Bei halbzahligen j durchläuft m eine gerade Anzahl von Werten $2j+1$.

* In mehreren Experimenten wie bei der Meßung von Energieniveaus z.B. des H-Atoms, oder der Aufspaltung eines Atomstrahls in einem äußeren Magnetfeld (Stern-Gerlach 1921) wurde eine Aufspaltung in z.B. eine gerade Anzahl von Niveaus beobachtet.

$\rightarrow$ Dieses muß einer anderen inneren Eigenschaft als dem $\hat{\vec{L}}$ von Atomen entsprechen, dem Spin. Wie stellen wir diesen dar?

bisher: Drehungen auf $|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\alpha\, \vec{n}\cdot\hat{\vec{L}}\right]|\psi\rangle$,

wobei $\psi(\vec{r}) = \langle \vec{r}|\psi\rangle \in \mathbb{C}$ eine skalare Funktion im Ortsraum.

- wir sind bereits matrixwertigen Darstellungen der Drehimpulsalgebra begegnet: $\hbar\, \Sigma_j$ (3×3)

$\Rightarrow$ wir verallgemeinern unsere Wellenfunktionen zu einem Vektor†, wobei jede Komponente dem neuen Freiheitsgrad Spin entspricht.

$$\langle \vec{r}, s|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \langle \vec{r}; s|\psi\rangle \\ \langle \vec{r}; s-1|\psi\rangle \\ \vdots \\ \langle \vec{r}; -s+1|\psi\rangle \\ \langle \vec{r}; -s|\psi\rangle \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^{2s+1}$$

wobei $\hat{S}_j$, $j = 1,2,3$ konstante $(2s+1)\times(2s+1)$ Matrizen sind, mit $\boxed{[\hat{S}_j, \hat{S}_k] = i\hbar\, \epsilon_{jkl}\, \hat{S}_l}$

(z.B. für $s=1$ $\hat{S}_j = \hbar\, \Sigma_j$).

† Dies ist die Wellenfunktion eines Teilchens mit Spin s, d.h. unsere bisherigen Wellenfunktionen waren alle mit Spin $s=0$.