5. Drehimpuls und Spin

5.1 Eigenwerte und Eigenfunktionen des Drehimpulses

klassisch: $\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p}$

$\rightarrow$ QM: $\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{x}} \times \hat{\vec{p}} \underset{=}{\text{Ortsraumdarst.}} \vec{x} \times \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$

$$\Rightarrow \hat{L}_k = \sum_{ij} \varepsilon_{ijk} \hat{x}_i \hat{p}_j$$

d.h. $\hat{L}_x = \hat{y} \hat{p}_z - \hat{z} \hat{p}_y$ etc.

Besitzen $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ gemeinsame Eigenfunktionen?

$\hookrightarrow [\hat{L}_x, \hat{L}_y] = [\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z] = ?$

Wir wissen schon, dass $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\, \delta_{ij}$

außerdem: $[A, B+C] = A(B+C) - (B+C)A = [A,B] + [A,C]$

(distributiv)

$\Rightarrow [\hat{L}_x, \hat{L}_y]$

$$= [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{z}\hat{p}_x] - \underbrace{[\hat{y}\hat{p}_z, \hat{x}\hat{p}_z]}_{=0} - \underbrace{[\hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x]}_{=0} + [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{x}\hat{p}_z]$$

da alle Operatoren im Kommutator miteinander vertauschen

$$= \hat{y}\hat{p}_z\hat{z}\hat{p}_x - \hat{z}\hat{p}_x\hat{y}\hat{p}_z + \hat{z}\hat{p}_y\hat{x}\hat{p}_z - \hat{x}\hat{p}_z\hat{z}\hat{p}_y$$

$$= \hat{y}\hat{p}_x \underbrace{[\hat{p}_z, \hat{z}]}_{-i\hbar} + \hat{x}\hat{p}_y \underbrace{[\hat{z}, \hat{p}_z]}_{i\hbar}$$

$$= i\hbar(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x) \qquad = i\hbar \hat{L}_z$$

zykl. Vertauschung $z \to x \to y \to z$

$$\boxed{\Rightarrow \quad [\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z \ , \ [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x \ , \ [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y}$$

$\Rightarrow$ keine gemeinsamen Eigenfunktionen

$\Rightarrow$ verschiedene Komponenten von $\vec{L}$ können nicht gleichzeitig scharf gemessen werden.

Dagegen kann für $\hat{\vec{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$

zeigen, dass

$$\boxed{[\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_x] = [\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_y] = [\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_z] = 0}$$ (→ Lösung)

$\Rightarrow$ Es gibt gemeinsame Eigenfunktionen von $\hat{\vec{L}}^2$ und <u>einer</u> Komponenten $\hat{L}_k$,
d.h. der quadrierte Betrag von $\vec{L}$ und der Wert einer Komponenten können gleichzeitig scharf gemessen werden.

Üblicher Weise konstruiert man gemeinsame Eigenfunktionen von $\hat{\vec{L}}^2$ und $\hat{L}_z$.
Dazu verwenden wir im Folgenden wieder Leiteroperatoren ähnlich wie beim harmonischen Oszillator.

Def.: $\hat{L}_\pm := \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$

$$\Rightarrow [\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] = \underbrace{[\hat{L}_z, \hat{L}_x]}_{i\hbar \hat{L}_y} \pm i \underbrace{[\hat{L}_z, \hat{L}_y]}_{-i\hbar \hat{L}_x} = \pm \hbar \hat{L}_\pm$$

$$[\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_\pm] = 0$$

Sei $|\lambda, m\rangle$ ein gemeinsamer Eigenzustand von $\hat{\vec{L}}^2$ und $\hat{L}_z$ mit

$$\hat{\vec{L}}^2 |\lambda, m\rangle = \lambda \hbar^2 |\lambda, m\rangle$$

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

(Beachte: $[\hat{L}] = [\text{Länge} * \text{Impuls}] = [\text{Wirkung}] = [\hbar]$)

Dann folgt:

$$\hat{\vec{L}}^2 (\hat{L}_\pm |\lambda, m\rangle) = \hat{L}_\pm \hat{\vec{L}}^2 |\lambda, m\rangle = \lambda \hbar^2 (\hat{L}_\pm |\lambda, m\rangle)$$

$$\begin{aligned} \hat{L}_z (\hat{L}_\pm |\lambda, m\rangle) &= \hat{L}_\pm \hat{L}_z |\lambda, m\rangle + [\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] |\lambda, m\rangle \\ &= m\hbar \hat{L}_\pm |\lambda, m\rangle \pm \hbar \hat{L}_\pm |\lambda, m\rangle \\ &= (m \pm 1)\hbar (L_\pm |\lambda, m\rangle) \end{aligned}$$

$\Rightarrow$ $\hat{L}_\pm |\lambda, m\rangle$ ist ebenfalls ein Eigenzustand von $\vec{L}^2$ mit Eigenwert $\lambda\hbar^2$ und von $\hat{L}_z$, jedoch mit Eigenwert $(m \pm 1)\hbar$.

$\Rightarrow$ $\hat{L}_\pm$ = Auf-/Absteigeoperator bzgl. m.

Wir nehmen jetzt an, dass die $|\lambda, m\rangle$ normiert sind, $\langle \lambda, m | \lambda, m\rangle = 1$ und schreiben

$$\hat{L}_\pm |\lambda, m\rangle = \alpha_{m\pm1} |\lambda, m\pm1\rangle , \qquad \alpha_{m\pm1} \in \mathbb{C}$$

Außerdem gilt:

- $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ sind hermitesch (Observable!):

$$\hat{L}_x^\dagger = \hat{L}_x \qquad \text{etc.}$$

$$\Rightarrow \hat{L}_\pm^\dagger = (\hat{L}_x \pm i \hat{L}_y)^\dagger = \hat{L}_x \mp i \hat{L}_y = \hat{L}_\mp$$

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

$$\Rightarrow \hat{\vec{L}}^2 = \hat{L}_- \hat{L}_+ + \hat{L}_z^2 + \hbar \hat{L}_z$$

$$\overset{\text{analog}}{=} \hat{L}_+ \hat{L}_- + \hat{L}_z^2 - \hbar \hat{L}_z$$

Daraus folgt:

$$\lambda \hbar^2 = \langle \lambda, m | \hat{\vec{L}}^2 | \lambda, m\rangle$$

$$= \langle \lambda, m | \underbrace{\hat{L}_- \hat{L}_+}_{\hat{L}_+^\dagger \hat{L}_+} | \lambda, m\rangle + \langle \lambda, m | \hat{L}_z^2 + \hbar \hat{L}_z | \lambda, m\rangle$$

$$= |\alpha_{m+1}|^2 + m(m+1)\hbar^2$$

$$\overset{\text{analog}}{=} |\alpha_{m-1}|^2 + m(m-1)\hbar^2$$

$|\alpha_{m\pm1}|^2 \geq 0 \quad \Rightarrow$ zu vorgegebenem λ kann $|m|$ nicht beliebig groß werden.

$\Rightarrow$ Es gibt ein maximales m, $m_{max}(\lambda) =: l$,
und ein minimales m, $m_{min}(\lambda) =: \bar{l}$,

mit $\hat{L}_+ |\lambda, l\rangle = 0 = \hat{L}_- |\lambda, \bar{l}\rangle$.

$$\Rightarrow \hat{\vec{L}}^2 |\lambda, l\rangle = (\hat{L}_-\hat{L}_+ + \hat{L}_z^2 + \hbar \hat{L}_z)|\lambda, l\rangle = l(l+1)\hbar^2 |\lambda, l\rangle$$

$$\hat{\vec{L}}^2 |\lambda, \bar{l}\rangle = \bar{l}(\bar{l}-1)\hbar^2 |\lambda, \bar{l}\rangle$$

$$\Rightarrow \lambda = l(l+1) = \bar{l}(\bar{l}-1)$$

Diese Gleichung hat formal zwei Lösungen:

$\bar{l} = l+1$ ($\Rightarrow m_{min} > m_{max}$ $\lightning$)

$\vee$ $\bar{l} = -l$ ✓ (mit $l \geq 0$)

Da $\hat{L}_\pm$ m jeweils um 1 erhöht / erniedrigt, muss die Differenz $l - \bar{l}$ ganzzahlig sein, damit die Rekursion an beiden Enden abbrechen kann:

$l - \bar{l} = 2l$ ganzzahlig

$\Rightarrow l$ ist halbzahlig: $l = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \ldots$

Üblicher Weise ändert man nun die Notation und charakterisiert die Eigenzustände $\hat{\vec{L}}^2$ durch l, statt durch $\lambda = l(l+1)$:

$$|\lambda, m\rangle_{alt} \equiv |l, m\rangle_{neu}$$

Für die Eigenzustände und Eigenwerte gilt dann:

$$\boxed{\begin{array}{l} \hat{\vec{L}}^2 \, |l,m\rangle = l(l+1)\hbar^2 \, |l,m\rangle \\ \hat{L}_z \, |l,m\rangle = m\hbar \, |l,m\rangle \\ \text{mit} \quad l = 0, \tfrac{1}{2}, 1, \tfrac{3}{2}, \ldots \\ \text{und} \quad m = -l, -l+1, \ldots, l-1, l \end{array}}$$

<u>Bemerkungen:</u>

- Für $l > 0$ ist die „Länge" von $\vec{L}$ größer als die maximale z-Komponente:

$$\sqrt{l(l+1)}\,\hbar > l\hbar \qquad \text{für } l > 0.$$

- Bislang haben wir die Eigenzustände noch nicht explizit konstruiert. Die Beschränkung auf halbzahlige l ergab sich aus den Abbruchbedingungen und bedeutet, dass keine anderen Werte von l möglich sind. Es bedeutet jedoch nicht, dass alle diese Werte tatsächlich als Lösungen des Eigenwertproblems auftreten.
Wie wir gleich sehen werden, lässt $\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{x}} \times \hat{\vec{p}}$ nur ganzzahlige l zu.
Es gibt jedoch verallgemeinerte Drehimpulse mit den gleichen Kommutatorrelationen („Spin" → Abschnitt 5.2), bei denen halbzahlige l auftreten.

Darstellung von $\hat{L}^2$ und $\hat{L}_z$ in Kugelkoordinaten:

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\Theta} \frac{\partial}{\partial\Theta} \left(\sin\Theta \frac{\partial}{\partial\Theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\Theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right]$$

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial\varphi}$$

Vergleich mit der Winkelgleichung aus dem Separationsansatz von Abschnitt 4.1 (→ S. 67, 69)

$$\frac{1}{\hbar^2} \hat{L}^2 Y_\ell^m(\Theta, \varphi) = \ell(\ell+1) Y_\ell^m(\Theta, \varphi)$$

außerdem: $Y_\ell^m \sim P_\ell^m(\cos\Theta)\, e^{im\varphi}$

$$\Rightarrow \hat{L}_z Y_\ell^m = m\hbar\, Y_\ell^m$$

⇒ Die Y_ℓ^m sind die gesuchten Eigenfunktionen von $\hat{L}^2$ und $\hat{L}_z$!

- Aus dem Separationsansatz folgt, dass ℓ nur ganzzahlige Werte annimmt.
- Wir verstehen jetzt, dass die ℓ-Quantenzahl im Zentralpotenzial-Problem tatsächlich mit dem Drehimpuls zusammenhängt, vgl. auch

$$V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} = V(r) + \frac{\langle \ell, m | \hat{L}^2 | \ell, m \rangle}{2mr^2}$$

- Beim Zentralpot.-Problem sind die Y_ℓ^m auch Eigenfunktionen von $\hat{H}$. Also muss auch gelten:

$$[\hat{H}, \hat{L}^2] = [\hat{H}, \hat{L}_z] = 0 \qquad (\to \text{Übung})$$