

Chapter 4

Eigenschaften der Drehimpulsoperatoren

4.1 Räumliche Drehungen

Der Drehimpuls ist inhärent mit räumlichen Rotationen verknüpft. Analog ist der normale Impuls erhalten, wenn ein System translations-invariant ist (Satz von Noether). Um rotations-invariante Potentiale quantenmechanisch zu behandeln, wie das Wasserstoffatom, müssen wir uns daher zuerst mit den Eigenschaften der quantenmechanischen Drehimpulsoperatoren auseinandersetzen.

4.1.1 Die Drehimpulsoperatoren

Wir betrachten 3-dimensionale Systeme mit rotationssymmetrischen Potentialen, d.h.

$$i\hbar \frac{d}{dt} \Psi(\vec{x}, t) = \mathbf{H} \Psi(\vec{x}, t), \quad \mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r)$$

wobei $r = |\vec{x}|$. In der klassischen Mechanik ist der Drehimpuls $\vec{l} = (l_1, l_2, l_3)$ für rotationssymmetrische Systeme erhalten:¹

$$\vec{l} = \vec{x} \times \vec{p}, \quad \frac{d\vec{l}}{dt} = 0, \quad l_i = \epsilon_{ijk} x_j p_k .$$

Die Lösung des Keplerproblems in der klassischen Mechanik gelingt unter Ausnutzung der Energie- und der Drehimpulserhaltung, beides sind auch quantenmechanische Erhaltungsgrößen. Um die Drehimpulserhaltung bei der Lösung des Wasserstoffatoms auszunützen, werden wir uns im folgenden näher mit den Eigenschaften der Drehimpulsoperatoren beschäftigen.

¹Wir erinnern an die Eigenschaften des total antisymmetrischen Tensors ϵ_{ijk} (Levi-Civita Symbol): $\epsilon_{ijk}\epsilon_{pqk} = \delta_{ip}\delta_{jq} - \delta_{iq}\delta_{jp}$, wobei über gleich Indizes summiert wird. Analog gilt $\epsilon_{jmn}\epsilon_{imn} = 2\delta_{ji}$ und $\epsilon_{ijk}\epsilon_{ijk} = 6$.

Bahn-Drehimpuls

Nach dem Korrespondenzprinzip werden die klassischen Variablen Ort und Impuls via

$$\begin{aligned} x_j &\rightarrow \mathbf{Q}_j && \text{Multiplikation mit } x_j \\ p_j &\rightarrow \mathbf{P}_j && \text{"Multiplikation" mit } \frac{\hbar}{i} \partial_j \end{aligned}$$

zu Operatoren im Hilbertraum der quadratintegrablen Wellenfunktionen. Analog wird auch der Drehimpuls via

$$\begin{aligned} \vec{l} &\rightarrow \vec{\mathbf{L}} = \vec{\mathbf{Q}} \times \vec{\mathbf{P}} \\ &= \frac{\hbar}{i} (x_2 \partial_3 - x_3 \partial_2, x_3 \partial_1 - x_1 \partial_3, x_1 \partial_2 - x_2 \partial_1) \end{aligned}$$

zum *Bahn-Drehimpulsoperator* $\vec{\mathbf{L}}$. Es gibt noch den Eigendrehimpuls (Spin) der Elektronen, den wir später behandeln werden. Der Drehimpuls ist eine physikalische Observable und somit (wie $\vec{\mathbf{x}}$ und $\vec{\mathbf{P}}$) selbstadjungiert.

Vertauschungs-Relationen

Die karthesischen Komponenten $\mathbf{L}_1, \mathbf{L}_2, \mathbf{L}_3$ genügen den Vertauschungs-Relationen

$$[\mathbf{L}_k, \mathbf{L}_n] \equiv \mathbf{L}_k \mathbf{L}_n - \mathbf{L}_n \mathbf{L}_k = i\hbar \epsilon_{knm} \mathbf{L}_m$$

Zum Beweis betrachte man

$$[L_k, L_l] = \epsilon_{kij} \epsilon_{lmn} [r_i p_j, r_m p_n], \quad [r_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}.$$

Die Zwischenrechnung

$$\begin{aligned} [r_i p_j, r_m p_n] &= r_i p_j r_m p_n - r_m p_n r_i p_j \\ &= r_i ([p_j, r_m] + r_m p_j) p_n - r_m ([p_n, r_i] + r_i p_n) p_j \\ &= -i\hbar r_i \delta_{jm} p_n + i\hbar r_m \delta_{ni} p_j \end{aligned}$$

führt auf

$$\begin{aligned} \epsilon_{kij} \epsilon_{lmn} \delta_{jm} &= -\epsilon_{kij} \epsilon_{lnj} = \delta_{kn} \delta_{il} - \delta_{kl} \delta_{in} \\ \epsilon_{kij} \epsilon_{lmn} \delta_{ni} &= -\epsilon_{kjn} \epsilon_{lmn} = \delta_{km} \delta_{jl} - \delta_{kl} \delta_{jm} \end{aligned}$$

Eingesetzt heben sich jeweils die letzten Terme gegenseitig auf, was zu

$$[L_k, L_l] = i\hbar (r_k p_l - r_l p_k)$$

führt, Q.E.D.

4.1.2 Erzeugende für Drehungen

Reelle orthogonale 3×3 Matrizen R definieren räumliche Drehungen:

$$\begin{aligned} \vec{x} &\rightarrow \vec{y} = R\vec{x} \\ |\vec{y}| &= |R\vec{x}| = |\vec{x}| \quad \det(R) = \mathbf{1} \end{aligned}$$

Mit $R^T = R^{-1}$ muss die transponierte Matrix gleich der Inversen sein. Unter Rotationen ändern Vektoren nicht die Länge, daher $\det(R) = 1$. In Komponenten:

$$R = (a_{jk}) \quad \sum_{l=1}^3 a_{jl}a_{kl} = \delta_{jk} \quad (RR^T = \mathbf{1})$$

Darstellung

Wegen $R^T = R^{-1}$ gibt es nur 3 voneinander unabhängige Parameter. Hierfür kann man die 3 Drehwinkel $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$, um die x, y und z Achsen wählen. Die Drehmatrizen für "reine" Drehungen um eine der drei Achsen sind

$$\begin{aligned} R(\varphi_3) &= \begin{pmatrix} \cos \varphi_3 & \sin \varphi_3 & 0 \\ -\sin \varphi_3 & \cos \varphi_3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} & R(\varphi_1) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \varphi_1 & \sin \varphi_1 \\ 0 & -\sin \varphi_1 & \cos \varphi_1 \end{pmatrix} \\ R(\varphi_2) &= \begin{pmatrix} \cos \varphi_2 & 0 & -\sin \varphi_2 \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \varphi_2 & 0 & \cos \varphi_2 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Erzeugende

Für Drehungen um kleine Winkel sind die Ableitungen der Drehmatrizen von Bedeutung:

$$\left. \frac{dR(\varphi_3)}{d\varphi_3} \right|_{\varphi_3=0} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \equiv A_3$$

Von Interesse ist nun, daß auch Drehungen um einen endlichen Winkel ϕ_3 eine Funktion der 3×3 Matrix A_3 sind:

$$R(\varphi_3) = e^{A_3\varphi_3} = \mathbf{1} + A_3\varphi_3 + \frac{1}{2!}A_3^2\varphi_3^2 + \dots$$

Zum Beweis verwendet man die Eigenschaften der nicht-trivialen 2×2 Unter-Matrix:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad A^2 = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = -\mathbf{1} \quad A^3 = -A.$$

Damit zerfällt $\exp(A_3\phi_3)$ in gerade und ungerade Anteile, die separat aufsummiert werden können. Analog zu A_3 definiert man

$$A_1 = \frac{dR(\varphi_1)}{d\varphi_1}\Big|_{\varphi_1=0} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad A_2 = \frac{dR(\varphi_2)}{d\varphi_2}\Big|_{\varphi_2=0} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Man nennt die A_j die *Erzeugende* für infinitesimale Drehungen. Offenbar gilt $A_j^T = -A_j$.

Lie-Gruppe

Die erzeugenden 3×3 Matrizen A_j genügen den Vertauschungsrelationen

$$\boxed{[A_j, A_k] = -\epsilon_{jkl} A_l}$$

Da die Größen \mathbf{A}_j einerseits in einem Vektorraum operieren, andererseits aber noch den obigen algebraischen Vertauschungsrelationen genügen, bezeichnet man sie als Elemente der *Lie-Algebra der Drehgruppe*.

4.1.3 Drehungen von Wellenfunktionen

Mittels der Substitution $(i\hbar A_j) \rightarrow L_j$ gehen die Vertauschungsrelationen für die Erzeugenden formal in jene der Drehimpulsoperatoren über,

$$[A_j, A_k] = -\epsilon_{jkl} A_l, \quad [L_j, L_k] = i\hbar\epsilon_{jkl} L_l,$$

wobei letzteren im Hilbertraum der quadratintegrablen Funktionen wirken. Es liegt also nahe zu vermuten, daß die Drehimpulsoperatoren die Erzeugende für Rotationen von Wellenfunktionen sind:

$$\boxed{\psi(R(\vec{\varphi})\vec{x}) = e^{-i\vec{\mathbf{L}}\cdot\vec{\varphi}/\hbar} \psi(\vec{x})} \quad R(\vec{\varphi}) = e^{\vec{A}\cdot\vec{\varphi}}$$

mit $\vec{\varphi} = (\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3)$. Dabei ist $\psi(R\vec{x})$ die um die Achse $\vec{\varphi}/|\vec{\varphi}|$ und den Winkel $|\vec{\varphi}|$ gedrehte Wellenfunktion.

Beispiel

Zur Illustration betrachten wir den Fall einer (infinitesimal) kleinen Drehung um die z -Achse. Mit $R \cong \mathbf{1} + \varphi_3 A_3 + \dots$ erhalten wir

$$\begin{aligned} \psi(R\vec{x}) &= \psi(x_1 + \varphi_3 x_2, x_2 - \varphi_3 x_1, x_3) \\ &\cong \psi(\vec{x}) - \varphi_3 (x_1 \partial_2 - x_2 \partial_1) \psi(\vec{x}) \end{aligned}$$

sowie

$$\begin{aligned} e^{-i\vec{\mathbf{L}}\cdot\vec{\varphi}/\hbar} \psi(\vec{x}) &\cong \left(1 - \frac{i}{\hbar} \varphi_3 L_3\right) \psi(\vec{x}) \\ &= \left(1 - \varphi_3 (x_1 \partial_2 - x_2 \partial_1)\right) \psi(\vec{x}). \end{aligned}$$

4.2 Eigenwerte der Drehimpulsoperatoren

Wir beginnen mit einer mathematischen Vorbemerkung.

4.2.1 Gemeinsame Diagonalisierung von Operatoren

Satz

Sind A und B zwei selbstadjungierte Operatoren, so lassen sie sich genau dann gleichzeitig auf Diagonalform bringen falls sie vertauschen, d.h. falls $[A, B] = 0$ gilt. In diesem Fall haben sie ein gemeinsames System von Eigenfunktionen,

Beweis

1. Sind A und B zwei Matrizen in Diagonalform, so folgt notwendig $AB = BA$.
2. Es sei u_α Eigenvektor von A zum Eigenwert a_α :

$$Au_\alpha = a_\alpha u_\alpha .$$

Nach Voraussetzung gilt

$$a_\alpha Bu_\alpha = B(Au_\alpha) = A(Bu_\alpha) ,$$

d.h. mit u_α ist auch Bu_α Eigenvektor von A .

Fallunterscheidung

- (a) Falls der zu a_α gehörige Eigenvektorraum 1-dimensional ist, so muß Bu_α ein Vielfaches von u_α sein und es folgt $Bu_\alpha = b_\beta u_\alpha$, d.h. u_α ist auch Eigenvektor von B !
- (b) Der Eigenwert a_α ist entartet, d.h. der zu a_α gehörige Eigenvektorraum ist mehrdimensional. Bu_α liegt in diesem Unterraum und B kann, da es selbstadjungiert ist, in diesem Unterraum auf Diagonalform gebracht werden. Man kann also als Basis in dem zu a_α gehörigen Unterraum die Eigenvektoren $u_{\alpha\beta}$ von B wählen:

$$Bu_{\alpha\beta} = b_\beta u_{\alpha\beta}, \quad \alpha \text{ fest}, \quad \beta = \beta_1, \beta_2, \dots$$

Beispiel

Aus Abschnitt ?? haben wir diesen Zusammenhang schon am Beispiel des eindimensionalen Potentialtopfes kennengelernt. Dabei war $A = \mathbf{\Pi}$ der Paritätsoperator und $B = \mathbf{H}$ der Hamiltonian.

Die Eigenwerte ± 1 von $\mathbf{\Pi}$ sind unendlichfach entartet. Die entsprechenden zwei Unterräume enthalten jeweils abzählbar viele Eigenvektoren von \mathbf{H} : $u_n^{(+)}$ mit $n = 0, 1, 2, \dots$ und $u_n^{(-)}$ mit $n = 1, 2, 3, \dots$

4.2.2 Gesamtdrehimpuls

Da die \mathbf{L}_j nicht miteinander kommutieren, haben sie kein gemeinsames Eigensystem.

Das Quadrat des Gesamtdrehimpuls $\boxed{\vec{\mathbf{L}}^2 = \mathbf{L}_1^2 + \mathbf{L}_2^2 + \mathbf{L}_3^2}$ vertauscht jedoch mit den einzelnen Komponenten:

$$\begin{aligned} [\vec{\mathbf{L}}^2, \mathbf{L}_3] &= \vec{\mathbf{L}}^2 \mathbf{L}_3 - \mathbf{L}_3 \vec{\mathbf{L}}^2 \\ &= (\mathbf{L}_1^2 + \mathbf{L}_2^2) \mathbf{L}_3 - \mathbf{L}_3 (\mathbf{L}_1^2 + \mathbf{L}_2^2) \\ &= \mathbf{L}_1 (\mathbf{L}_1 \mathbf{L}_3 - \mathbf{L}_3 \mathbf{L}_1) + (\mathbf{L}_1 \mathbf{L}_3 - \mathbf{L}_3 \mathbf{L}_1) \mathbf{L}_1 \\ &\quad + \mathbf{L}_2 (\mathbf{L}_2 \mathbf{L}_3 - \mathbf{L}_3 \mathbf{L}_2) + (\mathbf{L}_2 \mathbf{L}_3 - \mathbf{L}_3 \mathbf{L}_2) \mathbf{L}_2 . \end{aligned}$$

Mit $[\mathbf{L}_i, \mathbf{L}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \mathbf{L}_k$ folgt (modulo $i\hbar$):

$$[\vec{\mathbf{L}}^2, \mathbf{L}_3] \rightarrow -\mathbf{L}_1 \mathbf{L}_2 - \mathbf{L}_2 \mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2 \mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_1 \mathbf{L}_2 .$$

Allgemein gilt daher

$$\boxed{[\vec{\mathbf{L}}^2, \mathbf{L}_j] = 0, \quad j = 1, 2, 3}$$

Man kann also gemeinsame Eigenvektoren zu $\vec{\mathbf{L}}^2$ und, z.B., zu \mathbf{L}_3 suchen.

Auf- und Absteigeoperatoren

Man bezeichnet mit \mathbf{L}_+ und \mathbf{L}_- den **Auf-** bzw. den **Absteigeoperator**,

$$\boxed{\mathbf{L}_+ = \mathbf{L}_1 + i\mathbf{L}_2, \quad \mathbf{L}_- = \mathbf{L}_1 - i\mathbf{L}_2,}$$

mit den Vertauschungsrelationen

$$\begin{aligned} [\mathbf{L}_3, \mathbf{L}_+] &= \hbar \mathbf{L}_+ & [\mathbf{L}_3, \mathbf{L}_-] &= -\hbar \mathbf{L}_- \\ \mathbf{L}_+ \mathbf{L}_- &= \vec{\mathbf{L}}^2 + \hbar \mathbf{L}_3 - \mathbf{L}_3^2 \\ \mathbf{L}_- \mathbf{L}_+ &= \vec{\mathbf{L}}^2 - \hbar \mathbf{L}_3 - \mathbf{L}_3^2 \\ (\mathbf{L}_\pm u_1, u_2) &= (u_1, \mathbf{L}_\mp u_2) \end{aligned}$$

Die \mathbf{L}_i sind selbstadjungiert, damit sind \mathbf{L}_\pm die Adjungierten von \mathbf{L}_\mp (letzte Relation). Als Beispiel beweisen wir

$$\begin{aligned} [\mathbf{L}_3, \mathbf{L}_+] &= [\mathbf{L}_3, \mathbf{L}_1] + i[\mathbf{L}_3, \mathbf{L}_2] \\ &= i\hbar \mathbf{L}_2 - i^2 \hbar \mathbf{L}_1 \equiv \hbar \mathbf{L}_+ \end{aligned}$$

und

$$\mathbf{L}_- \mathbf{L}_+ = \mathbf{L}_1^2 + \mathbf{L}_2^2 + i(\mathbf{L}_1 \mathbf{L}_2 - \mathbf{L}_2 \mathbf{L}_1) = \vec{\mathbf{L}}^2 - \mathbf{L}_3^2 + i^2 \hbar \mathbf{L}_3 .$$

4.2.3 Diagonalisierung der Drehimpulsoperatoren

Der Gesamtdrehimpuls $\vec{\mathbf{L}}^2$ ist positiv definit,

$$(u, \vec{\mathbf{L}}^2 u) = \sum_{j=1}^3 (\mathbf{L}_j u, \mathbf{L}_j u) \geq 0.$$

Zu einem Eigenvektor v_λ von $\vec{\mathbf{L}}^2$ können wir den Eigenwert also in der Form $\hbar^2 \lambda(\lambda + 1)$ schreiben, mit $\lambda \geq 0$:

$$\vec{\mathbf{L}}^2 v_\lambda = \hbar^2 \lambda(\lambda + 1) v_\lambda, \quad \lambda \geq 0$$

Da \mathbf{L}_3 mit $\vec{\mathbf{L}}^2$ vertauscht, können wir die v_λ so wählen, daß sie gleichzeitig Eigenvektoren zu \mathbf{L}_3 sind, mit Eigenwert $\hbar\mu$:

$$\mathbf{L}_3 v_\mu = \hbar\mu v_\mu$$

Der Eigenwert $\lambda(\lambda + 1)$ wird i.a. entartet sein, da zu vorgegebenem Gesamtdrehimpuls verschiedene Werte der \mathbf{L}_3 -Komponente gehören können.

Wegen $(v_\mu, \mathbf{L}_3^2 v_\mu) \leq (v_\mu, \vec{\mathbf{L}}^2 v_\mu)$ gilt

$$\mu^2 \leq \lambda(\lambda + 1)$$

Bei vorgegebenem λ gibt es also ein μ_{max} und ein μ_{min} .

Maximaler Eigenwert von L_3

Betrachtet man die Eigenwertgleichung für \mathbf{L}_3 für die Funktion $\mathbf{L}_+ v_\mu$, so erhält man

$$\mathbf{L}_3 (\mathbf{L}_+ v_\mu) = ([\mathbf{L}_3, \mathbf{L}_+] + \mathbf{L}_+ \mathbf{L}_3) v_\mu = \hbar(\mu + 1) (\mathbf{L}_+ v_\mu)$$

wobei wir $[\mathbf{L}_3, \mathbf{L}_+] = \hbar\mathbf{L}_+$ verwendet haben. Die Wellenfunktion $\mathbf{L}_+ v_\mu$ ist also wieder eine Eigenfunktion von \mathbf{L}_3 , nun zum Eigenwert $\hbar(\mu + 1)$. Daher muß

$$\mathbf{L}_+ v_{\mu_{max}} = 0$$

gelten. Wegen der Identität $\vec{\mathbf{L}}^2 = \mathbf{L}_- \mathbf{L}_+ + \mathbf{L}_3^2 + \hbar\mathbf{L}_3$ folgt

$$\begin{aligned} \hbar^2 \lambda(\lambda + 1) v_{\mu_{max}} &= \vec{\mathbf{L}}^2 v_{\mu_{max}} \\ &= (\mathbf{L}_- \mathbf{L}_+ + \mathbf{L}_3^2 + \hbar\mathbf{L}_3) v_{\mu_{max}} \\ &= \hbar^2 \mu_{max} (\mu_{max} + 1) v_{\mu_{max}}. \end{aligned}$$

Da $\lambda \geq 0$ gilt

$$\mu_{max} = \lambda$$

Minimaler Eigenwert von L_3

Analog gilt

$$\mathbf{L}_3 (\mathbf{L}_- v_\mu) = \hbar(\mu - 1) \mathbf{L}_- v_\mu, \quad \mathbf{L}_- v_{\mu_{min}} = 0.$$

Wegen $\vec{\mathbf{L}}^2 = \mathbf{L}_+\mathbf{L}_- + \mathbf{L}_3^2 - \hbar\mathbf{L}_3$ bedeutet dies

$$\begin{aligned}\hbar^2\lambda(\lambda+1)v_{\mu_{\min}} &= (\mathbf{L}_+\mathbf{L}_- + \mathbf{L}_3^2 - \hbar\mathbf{L}_3)v_{\mu_{\min}} \\ &= \hbar^2\mu_{\min}(\mu_{\min}-1)v_{\mu_{\min}},\end{aligned}$$

also

$$\mu_{\min} = -\lambda$$

Eigenwerte von $\vec{\mathbf{L}}^2$

Wir bezeichnen nun die Eigenfunktionen mit

$$v_{\lambda\mu}, \quad \mu = -\lambda, -\lambda+1, \dots, \lambda.$$

Ausgehend von der Eigenfunktion $v_{\lambda\lambda}$ lassen sich alle andere Eigenfunktionen im selben Unterraum zum gleichen Gesamtdrehimpuls λ durch wiederholtes Anwenden des Absteigeoperators konstruieren:

$$\mathbf{L}_-^n v_{\lambda\lambda} \sim v_{\lambda\lambda-n}, \quad n = 0, 1, \dots.$$

Schließlich muß es eine ganze Zahl n geben, so daß $\lambda - n = \mu_{\min} = -\lambda$. Man kann auch umgekehrt schließen: Für jedes n existiert ein λ , so daß

$$2\lambda = n, \quad n = 0, 1, 2, \dots.$$

Damit ist folgendes bewiesen:

Das Quadrat des Drehimpulsoperators $\vec{\mathbf{L}}^2$ hat die Eigenwerte

$$\hbar^2 j(j+1), \quad j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots.$$

Bei festem j hat $\hbar\mathbf{L}_3$ die $2j+1$ Werte

$$\hbar m, \quad m = -j, -j+1, \dots.$$

Quantisierungsachse

Wir haben bei der Herleitung der Eigenwerte der Drehimpulsoperatoren die “Quantisierungsachse” willkürlich als die z -Achse festgelegt. Ebensogut hätte man die x , die y -Achse, oder irgendeine andere nehmen können. Hat man sich einmal auf eine Quantisierungsrichtung festgelegt, so ist die Darstellung (Matrixelemente) der anderen Drehimpulsoperatoren in dieser Darstellung von Interesse.

Matrixelemente

Nach Konstruktion gilt

$$\mathbf{L}_+ v_{jm} = N v_{j,m+1}.$$

Sind die v_{jm} normiert, so bestimmen sich die Matrixelemente N zu

$$\begin{aligned} N^2 &= (\mathbf{L}_+ v_{jm}, \mathbf{L}_+ v_{jm}) = (v_{jm}, \mathbf{L}_- \mathbf{L}_+ v_{jm}) \\ &= (v_{jm}, (\mathbf{L}^2 - \hbar \mathbf{L}_3 - \mathbf{L}_3^2) v_{jm}) \\ (N/\hbar)^2 &= j(j+1) - m(m+1). \end{aligned}$$

Analog für $\mathbf{L}_- v_{jm}$. Also

$$\begin{aligned} \mathbf{L}_+ v_{jm} &= \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} v_{j, m+1} \\ \mathbf{L}_- v_{jm} &= \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} v_{j, m-1} \end{aligned}$$

Mittels dieser Formeln kann man sich die Matrixelemente der kartesischen Komponenten $\mathbf{L}_1 = (\mathbf{L}_+ + \mathbf{L}_-)/2$ und $\mathbf{L}_2 = (\mathbf{L}_+ - \mathbf{L}_-)/(2i)$ berechnen.

4.2.4 Der Spin $j = \frac{1}{2}$

Der Bahndrehimpuls von Elektronen ist durch ganzzahlige Quantenzahlen $j = 0, 1, 2, \dots$ charakterisiert, wie wir später zeigen werden. Diese entsprechen s , p , d -Wellen, etc.

Der Eigendrehimpuls von fermionische Elementarteilchen (Spin) ist dagegen $j = 1/2$. Wir werden uns später mit dem Spin der Elektronen noch ausführlich beschäftigen, hier eine erste Einführung.

Pauli-Matrizen

Für $j = 1/2$ gibt es $2j + 1 = 2$ Eigenzustände. Wir verzichten im Folgenden den Gesamtdrehimpuls mit v_{lm} explizit anzugeben, und bezeichnen die beiden möglichen Zustände zu $m = \pm 1/2$ mit $v_m = v_{\pm 1/2}$,

$$(v_m, \mathbf{L}_3 v_{m'}) = \hbar m \delta_{mm'}.$$

Demnach gehört zu \mathbf{L}_3/\hbar die Matrix

$$\frac{\mathbf{L}_3}{\hbar} \rightarrow \tilde{S}_3 = \frac{1}{2} \sigma_3, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Ferner gilt

$$\mathbf{L}_+ v_{1/2} = 0, \quad \mathbf{L}_+ v_{-1/2} = \hbar v_{1/2}, \quad \frac{\mathbf{L}_+}{\hbar} \rightarrow \tilde{S}_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

sowie

$$\mathbf{L}_- v_{-1/2} = 0, \quad \mathbf{L}_- v_{1/2} = \hbar v_{-1/2}, \quad \frac{\mathbf{L}_-}{\hbar} \rightarrow \tilde{S}_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Mit

$$\mathbf{L}_1 = \frac{1}{2}(\mathbf{L}_+ + \mathbf{L}_-), \quad \mathbf{L}_2 = \frac{1}{2i}(\mathbf{L}_+ - \mathbf{L}_-),$$

erhalten wir

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{L}_1}{\hbar} &\rightarrow \tilde{S}_1 = \frac{1}{2}\sigma_1, & \sigma_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \frac{\mathbf{L}_2}{\hbar} &\rightarrow \tilde{S}_2 = \frac{1}{2}\sigma_2, & \sigma_2 &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Mit den *Pauli Matrizen* σ_i , $i = 1, 2, 3$, werden wir uns später noch ausführlich beschäftigen.

4.2.5 Bahndrehimpuls und Kugelfunktionen

Wir setzen $\tilde{\mathbf{L}}_j = \mathbf{L}_j/\hbar$, $j = 1, 2, 3$, und benutzen

$$\tilde{\mathbf{L}}_1 = \frac{1}{i}(x_2\partial_3 - x_3\partial_2), \quad \tilde{\mathbf{L}}_2 = \frac{1}{i}(x_3\partial_1 - x_1\partial_3), \quad \tilde{\mathbf{L}}_3 = \frac{1}{i}(x_1\partial_2 - x_2\partial_1)$$

um die Eigenfunktionen der Drehimpulsoperatoren herzuleiten.

Polarkoordinaten

In Polarkoordinaten,

$$x_1 = r \cos \varphi \sin \vartheta, \quad x_2 = r \sin \varphi \sin \vartheta, \quad x_3 = r \cos \vartheta,$$

nehmen die reskalierten Drehimpulsoperatoren die folgende Form an:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{L}}_3 &= \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \tilde{\mathbf{L}}_+ &= e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ \tilde{\mathbf{L}}_- &= e^{-i\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ \tilde{\mathbf{L}}^2 &= -\frac{1}{\sin^2 \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \end{aligned}$$

Der Radius r fällt heraus, da die Transformation von kartesischen- zu Polarkoordinaten linear in r ist. Die Herleitung ist länglich und verwendet für

$$\frac{\partial}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial \vartheta} \frac{\partial \vartheta}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial x_i}$$

die inverse Transformation

$$r^2 = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2, \quad \cos \vartheta = \frac{x_3}{r}, \quad \tan \varphi = \frac{x_2}{x_1}.$$

Kugelfunktionen

Die gemeinsamen Eigenfunktionen von $\tilde{\mathbf{L}}^2$ und $\tilde{\mathbf{L}}_3$ heißen *Kugelfunktionen*, man bezeichnet sie mit $Y_{lm}(\varphi, \vartheta)$, hier für $j = l$. Für $m = l$ gelten die Differential-Gleichungen

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{L}}_3 Y_{ll} &= \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} Y_{ll}(\varphi, \vartheta) = l Y_{ll}(\varphi, \vartheta) \\ \tilde{\mathbf{L}}_+ Y_{ll} &= e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) Y_{ll}(\varphi, \vartheta) = 0 \end{aligned}$$

Der Produktansatz $Y_{ll}(\varphi, \vartheta) = f_1(\varphi) f_2(\vartheta)$ führt zu der (normierten) Lösung

$$Y_{ll}(\varphi, \vartheta) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \left[\frac{(2l+1)!}{4\pi} \right]^{\frac{1}{2}} e^{il\varphi} (\sin \vartheta)^l$$

Die Phase $(-1)^l$ ist Konvention. Wegen

$$\tilde{\mathbf{L}}_- Y_{lm} = \sqrt{l(l+1) - m(m-1)} Y_{l, m-1}$$

kann man nun die übrigen Y_{lm} aus Y_{ll} durch Anwenden von $\tilde{\mathbf{L}}_-$ iterativ berechnen²

$$Y_{lm}(\varphi, \vartheta) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \left[\frac{(2l+1)(l+m)!}{4\pi(l-m)!} \right]^{\frac{1}{2}} \cdot \frac{1}{\sin^m \vartheta} \frac{d^{l-m}}{(d \cos \vartheta)^{l-m}} \cdot (\sin \vartheta)^{2l} \cdot e^{im\varphi}$$

Modulo einer Normierung haben Kugelflächenfunktionen die Form

$$Y_{lm}(\varphi, \vartheta) \sim P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi}$$

wobei die $P_l^m(\cos \vartheta)$ die “zugeordneten Legendre-Polynome” sind.³

²Dazu benutzt man

$$\tilde{\mathbf{L}}_- \left(e^{il\varphi} (\sin \vartheta)^l \right) = e^{-i\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \left(e^{il\varphi} (\sin \vartheta)^l \right) = -e^{i(l-1)\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \vartheta} + l \cot \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) (\sin \vartheta)^l,$$

sowie dass (mit $d/d\vartheta = \sin \vartheta d/d \cos \vartheta$)

$$-\left(\frac{d}{d\vartheta} + l \cot \vartheta \right) f(\vartheta) = \frac{-1}{\sin^l \vartheta} \frac{d}{d\vartheta} \left(\sin^l \vartheta f(\vartheta) \right) = \frac{1}{\sin^{l-1} \vartheta} \frac{d}{d \cos \vartheta} \left(\sin^l \vartheta f(\vartheta) \right)$$

für eine beliebige differenzierbare Funktion $f(\vartheta)$ gilt, d.h. auch für $f(\vartheta) = \sin^l \vartheta$.

³Die zugeordneten Legendre-Polynome sind durch

$$P_l^m(z) = (-1)^m (1-z^2)^{m/2} \frac{d^m P_l(z)}{dz^m} = (-1)^m \frac{(1-z^2)^{m/2}}{2^l l!} \frac{d^{l+m}(z^2-1)^l}{dz^{l+m}}$$

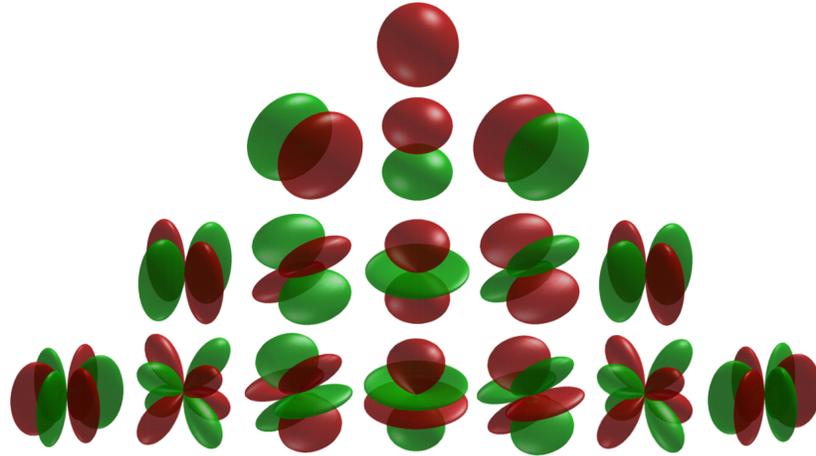


Figure 4.1: Die s , p , d und f Kugelfunktionen ($l = 0, 1, 2, 3$, von oben nach unten) [Wikipedia]. Die benutzte radiale Abhängigkeit $R_{lm}(r)$ werden wir im Abschnitt ?? im Rahmen des Wasserstoffatoms diskutieren.

Beispiele

$$\begin{aligned}
 Y_{00} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\
 Y_{11} &= -\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin \vartheta e^{i\varphi} \\
 Y_{10} &= \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \cos \vartheta \\
 Y_{1-1} &= \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin \vartheta e^{-i\varphi}
 \end{aligned}$$

Nomenklatur

Die Zustände mit $l = 0, 1, 2, 3$ werden auch als s-, p-, d- und f- Zustände bezeichnet. Die Bezeichnungen kommen aus der optischen Spektroskopie. Historisch sind sie Abkürzungen für “scharfe”, “prinzipielle”, “diffuse” und “feine” Linie.

definiert. Diese Beziehung gilt auch für negative m . Wegen

$$P_l^{-m}(z) = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(z),$$

haben wir

$$Y_{lm}(\varphi, \vartheta) = \left[\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!} \right]^{\frac{1}{2}} P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi}, \quad Y_{l-m} = (-1)^m Y_{lm}^*.$$

4.2.6 Eigenschaften der Kugelfunktionen

Viele Formeln werden übersichtlicher, falls man die Variable $z = \cos \vartheta$ einführt:

$$Y_{lm}(\varphi, \vartheta(z)) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(l+m)!}{4\pi(l-m)!}} (1-z^2)^{-m/2} \frac{d^{l-m}}{(dz)^{l-m}} \cdot (1-z^2)^l \cdot e^{im\varphi}.$$

Legendre-Polynome

Für $m = 0$ definiert man

$$Y_{lm=0} = \left(\frac{2l+1}{4\pi} \right)^{\frac{1}{2}} P_l(z) \quad \boxed{P_l(z) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l (z^2 - 1)^l}{dz^l}}$$

Die Funktionen $P_l(z)$ heißen *Legendre-Polynome*. Sie bilden ein vollständiges, orthogonales System im Intervall $[-1, +1]$.

Erzeugende Funktion

Legendre-Polynome kann man auch durch ihre *erzeugende Funktion* definieren, d.h. als Entwicklungskoeffizienten einer geeigneten Taylorreihe. Es sei $|\vec{y}| < |\vec{x}|$, mit $s = |\vec{y}|/|\vec{x}| < 1$:

$$\begin{aligned} |\vec{x} - \vec{y}|^{-1} &= \frac{1}{|\vec{x}|} (1 - 2zs + s^2)^{-\frac{1}{2}} \\ &= \frac{1}{|\vec{x}|} \sum_{l=0}^{\infty} P_l(z) s^l, \end{aligned}$$

Diese „*Entwicklung nach Multipolen*“ ist u.A. in der Elektrodynamik von zentraler Bedeutung.⁴

Multipolentwicklung

Die Funktionen $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ bilden ein vollständiges System auf der Einheitskugel,

$$0 \leq \vartheta \leq \pi, \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi.$$

Ist $f(\varphi, \vartheta)$ eine quadratintegrale Funktion auf der Einheitskugel, $(f, f) \equiv \int d\Omega f^* f$, mit $(f, f) < \infty$, dann läßt sich $f(\varphi, \vartheta)$ nach Kugelfunktionen entwickeln:

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

Skalarprodukt

Die Entwicklungskoeffizienten f_{lm} sind durch das Skalarprodukt

$$f_{lm} = (Y_{lm}, f) = \int d\Omega Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi) f(\varphi, \vartheta)$$

gegeben.

⁴Z.B. für die Behandlung des Potentials $V(\vec{x}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int d^3y \frac{\rho(\vec{y})}{|\vec{x}-\vec{y}|}$. Hier ist $\rho(\vec{y})$ die Ladungsdichte.

4.3 Stern-Gerlach Experiment

Der experimentelle Beweis für die “Quantelung” des Drehimpulses kann aus dem Stern-Gerlach-Versuch gewonnen werden.⁵

Bahndrehimpuls und magnetisches Dipolmoment

Bewegt sich eine Punktladung q eines Teilchens mit Masse m_0 auf einer geschlossenen Kurve C , so gehört zu dem Bahndrehimpuls \vec{l} das magnetische Dipolmoment

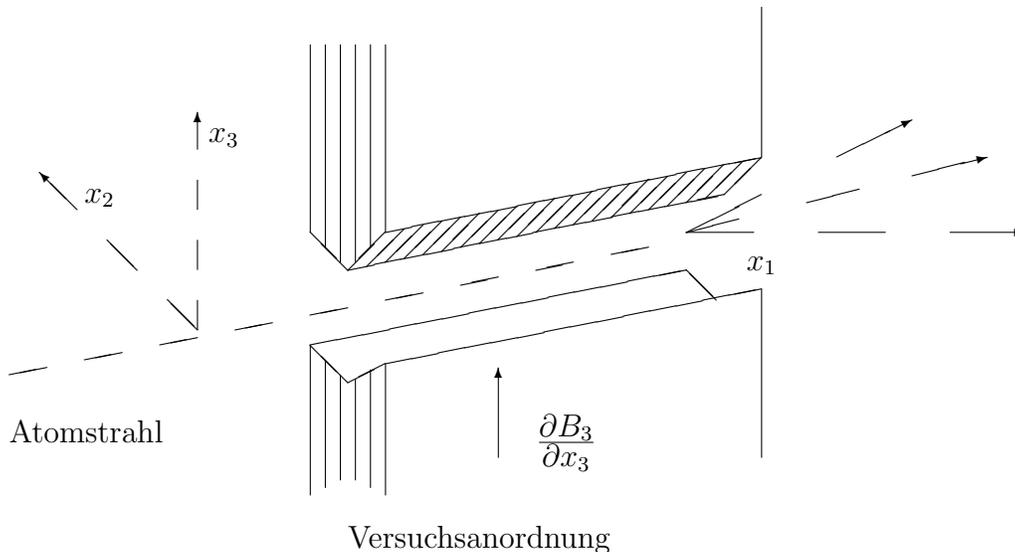
$$\vec{\mu} = \frac{q}{2m_0} \vec{l}$$

Teilchen in einem inhomogenen Magnetfeld

Ferner wird auf einen punktförmigen magnetischen Dipol in einem inhomogenen Magnetfeld $\vec{B}(\vec{x})$ die Kraft

$$\vec{K}(\vec{x}) = \text{grad}(\vec{\mu} \cdot \vec{B}(\vec{x}))$$

ausgeübt.



Von links (s. Skizze) werden Atome in der Ebene $x_2 = 0$ in ein inhomogenes Magnetfeld geschossen. Die Elektronen in den Atomen sollen bezüglich des Atomkernes den Drehimpuls (Bahndrehimpuls) \vec{l} haben, und damit das magnetische Moment $\vec{\mu} = -\frac{e_0}{2m_e} \vec{l}$, wobei

⁵Dieser Versuch wurde 1922 von Otto Stern und Walter Gerlach im Physikalischen Institut der Universität Frankfurt durchgeführt.

$e_0 > 0$ die Elementarladung ist. Somit erfahren die Elektronen (und damit die Atome) in x_3 -Richtung die Kraft

$$K_3(x_1, x_2 = 0, x_3) = \frac{\partial}{\partial x_3} (\mu_1 B_1 + \mu_2 B_2 + \mu_3 B_3) .$$

Zwischen den Magnetpolen ist $B_1 \equiv 0$, d.h. $\partial_3 B_1 = 0$. Ferner gilt $B_2(x_2 = 0) = 0$ und damit $\partial_3 B_2(x_2 = 0) = 0$; also

$$K_3(x_1, x_2 = 0, x_3) = \mu_3 \partial_3 B_3$$

Aufspaltung des Bahndrehimpulses

Quantenmechanisch gilt $l_3 \rightarrow \hbar m$, mit $l = 0, 1, \dots$ und $-l \leq m \leq l$. Also

$$\mu_3 = -\frac{e_0 \hbar}{2m_e} m, \quad -l \leq m \leq l$$

Demnach wären also auch die magnetischen (Bahn-) Momente gequantelt. Enthält nun der einfallende Strahl Atome, bei denen äußere Elektronen relativ zum Kern den Bahndrehimpuls \vec{l} haben, und sind (aufgrund der Präparierung) des Strahles etwa alle x_3 -Komponenten mit vergleichbaren Gewichten vertreten, so spaltet der Strahl aufgrund der Kraft K_3 in $2l + 1$ Komponenten räumlich auf (Nachweis z.B. durch Photoplatte).

Auf diese Weise kann man direkt nachweisen, daß die quantenmechanischen Bahndrehimpulse ganzzahlige Vielfache von \hbar sind.

Die Größe $\mu_B \equiv \frac{e_0 \hbar}{2m_e}$ heißt Bohr'sches Magneton.

$$\mu_B = 5,788382 \cdot 10^{-15} \text{ MeV gauss}^{-1} = 5,788382 \cdot 10^{-11} \text{ MeV T}^{-1}$$

Spin der Elektronen

In vielen Fällen sind die $2l + 1$ Teilstrahlen nochmal gespalten (Feinstruktur). So hat man z.B. bei Alkali-Metallen für $l = 0$ eine Aufspaltung in zwei Teilstrahlen. Dies rührt daher, daß die Elektronen einen Eigendrehimpuls oder Spin, $\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$, haben, und zu diesem das magnetische Moment

$$\vec{\mu}_e = -\frac{e_0}{2m_e} g \vec{S}, \quad g = 2 + 2(1159,652193 \pm 0,000010) \times 10^{-6}$$

gehört.