Kapitel 5

Eigenschaften der Drehimpulsoperatoren

5.1 Räumliche Drehungen

5.1.1 Die Drehimpulsoperatoren

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

$$\boxed{\begin{aligned} i\hbar\partial_t\Psi(\vec{x},t) &= \mathbf{H}\Psi(\vec{x},t)\ , \\ \mathbf{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r)\ , \qquad r = ||\vec{x}||\ . \end{aligned}}$$

In der klassischen Mechanik ist der Drehimpuls $\vec{l}$ für rotationsinvariante Systeme erhalten:

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

Die Lösung des Kepplerproblems in der klassichen 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.

Bahn-Drehimplus
Nach dem Korrespondenzprinzip werden die klassischen Variablen Ort und Impuls via

$$\boxed{\begin{aligned} x_j &\to \mathbf{Q}_j &: \quad &\text{Multiplikation mit } x_j\ , \\ p_j &\to \mathbf{P}_j &: \quad &\text{Multiplikationmit } \frac{\hbar}{i}\partial_j\ , \end{aligned}}$$

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

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

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. Die karthesischen Komponenten $\mathbf{L}_1$, $\mathbf{L}_2$, $\mathbf{L}_3$ genügen den Vertauschungs-Relationen (nachrechnen!)

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

Im folgenden sollen einige Eigenschaften von $\vec{\mathbf{L}}$ und sein Zusammenhang mit den räumlichen Drehungen näher untersucht werden.

5.1.2 Erzeugende für Drehungen

Eine 3×3 Matrix R definiert eine räumliche Drehungen falls diese orthogonal ist, $R^T = R^{-1}$:

$$\boxed{\begin{aligned} \vec{x} \rightarrow \quad \vec{y} \ &=\ R\vec{x}\ , \qquad RR^T \ =\ R^TR \ =\ 1_3\ , \qquad \det R \ =\ 1\ , \\ ||\vec{y}|| \ =\ ||R\vec{x}|| \ &=\ ||\vec{x}||\ . \qquad R^T\ :\ \text{transponierte Matrix;} \end{aligned}}$$

In Komponenten:

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

<u>**Dahrstellung**</u>

Wegen $R^T = R^{-1}$ gibt es nur 3 voneinander unabhängige Parameter. Hierfür kann man die 3 Drehwinkel φ_1, φ_2, φ_3 , um die x, y und z Achsen wählen. Die Drehmatrizen für "reine" Drehungen um eine der drei Achsen sind

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

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

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

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

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

Von Interesse ist nun, daß auch Drehungen um einen endlichen Winkel ϕ_3 ein Funktional der 3×3 Matrix A_3 sind (nachrechnen):

$$\boxed{R(\varphi_3) \;=\; e^{A_3\varphi_3} \;=\; 1_3 \,+\, A_3\varphi_3 \,+\, \frac{1}{2!}A_3^2\varphi_3^2 \,+\, \ldots}$$

Analog definiert man

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

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

Lie-Gruppe
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.*

5.1.3 Drehungen von Wellenfunktionen

Die erzeugenden 3 Matrizen A_j genügen den Vertauschungsrelationen

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

Somit genügen die Operatoren $(i\hbar\, A_j)$ denselben Vertauschungsrelationen wie die Drehimpulsoperatoren L_j, welche im Hilbertraum der quadratintegrablen Funktionen wirken. Es liegt also nahe zu vermuten, daß die Drehimpulsoperatoren die Erzeugende für Rotationen von Wellenfunktionen sind. Mit $A_j \to L_j/(i\hbar)$ finden wir:

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

mit $\vec{\varphi} = (\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3)$. Zur Illustration betrachten wir den Fall einer (infinitesimal) kleinen Drehung um die z-Achse, $R = 1_3 + \varphi_3 A_3 + \ldots$:

$$\begin{aligned} \psi(R\vec{x}) &= \psi(x_1 + \varphi_3 x_2, x_2 - \varphi_3 x_1, x_3) \cong \psi(\vec{x}) - \varphi_3 \left(x_1 \partial_2 - x_2 \partial_1\right) \psi(\vec{x}) \\ e^{-i\vec{\mathbf{L}}\cdot\vec{\varphi}/\hbar}\, \psi(\vec{x}) &= \Big(1 - \frac{i}{\hbar}\varphi_3 L_3\Big)\, \psi(\vec{x}) = \Big(1 - \varphi_3 (x_1 \partial_2 - x_2 \partial_1)\Big) \psi(\vec{x}) \ . \end{aligned}$$

5.2 Eigenwerte der Drehimpulsoperatoren

Wir beginnen mit einer mathematischen Vorbemerkung.

5.2.1 Gemeinsame Diagonalisierung von Operatoren

Satz

Sind A und B zwei selbstadjungierte Operatoren, so lassen sie sich genau dann gleichzeitig auf Diagonalform bringen, bzw. haben sie genau dann ein gemeinsames System von Eigenfunktionen, falls sie vertauschen, d.h. falls $[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = 0$.

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 :

   $$A u_\alpha = a_\alpha u_\alpha \ .$$

   Nach Vorraussetzung gilt

   $$B(A u_\alpha) = A(B u_\alpha) = a_\alpha B u_\alpha \ ,$$

   d.h. mit u_α ist auch $B u_\alpha$ Eigenvektor von A.
   Fallunterscheidung

   (a) Falls der zu a_α gehörige Eigenvektorraum 1–dimensional ist, so muß $B u_\alpha$ ein Vielfaches von u_α sein: $B u_\alpha = b_\beta u_\alpha$, 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. $B u_\alpha$ 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:

   $$\boxed{B u_{\alpha\beta} = b_\beta\, u_{\alpha\beta} \ , \qquad \alpha \ \text{fest} \ , \qquad \beta = \beta_1, \beta_2, \ldots}$$

Beispiel

Aus Kap. 3.6 haben wir diesen Zusammenhang schon am Beispiel des unendlich tiefen Potentialtopfes, $A = \mathbf{\Pi}$ und $B = \mathbf{H}$, kennengelernt. Die Eigenwerte von $\mathbf{\Pi}$: ± 1 sind unendlichfach entartet. Die entsprechenden 2 Unterräume enthalten jeweils abzählbar viele Eigenvektoren von $\mathbf{H}$: $u_n^{(+)}$, $n = 0, 1, \ldots$ und $u_n^{(-)}$,$n = 1, \ldots$.

5.2.2 Diagonalisierung der Drehimpulsoperatoren

Da die $\mathbf{L_j}$ nicht miteinander kommutieren, haben sie kein gemeinsames System von Eigenvektoren. 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:

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

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

$$
\boxed{[\vec{\mathbf{L}}^2, \mathbf{L}_3] \; = \; 0 \; , \qquad \text{und analog} \qquad [\vec{\mathbf{L}}^2, \mathbf{L}_j] = 0 \; , \quad j = 1, 2 \quad .}
$$

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**,

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

mit den Vertauschungsrelationen

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

Eigenwerte

$\vec{\mathbf{L}}^2$ 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 $\hbar^2\lambda(\lambda+1)$, $\lambda \geq 0$ schreiben:

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

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 $\hbar\mu$:

$$
\boxed{\mathbf{L}_3\, v_\mu \; = \; \hbar\mu\, v_\mu \; .}
$$

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

$$\boxed{\mu^2 \ \leq \ \lambda(\lambda+1)\ .}$$

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

Maximaler Eigenwert von L_3

Multipliziert man die Eigenwertgleichung für $\mathbf{L}_3$ mit $\mathbf{L}_+$ und beachtet $[\mathbf{L}_3, \mathbf{L}_+] = \hbar\mathbf{L}_+$, so hat man

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

$\mathbf{L}_+ v_\mu$ is also wieder eine Eigenfunktion von $\mathbf{L}_+$ zum Eigenwert $\hbar(\mu+1)$. Daher muß

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

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

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

Da $\lambda \geq 0$ gilt: $\boxed{\mu_{max} \ = \ \lambda\ .}$

Minimaler Eigenwert von L_3

Analog gilt

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

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

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

also

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

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

Wir bezeichnen nun die Eigenfunktionen mit

$$v_{\lambda\mu}, \qquad \mu = -\lambda,\ -\lambda+1,\ \ldots,\ \lambda\ .$$

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

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

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

$$\boxed{2\lambda \;=\; n \;\;,\;\; n = 0, 1, 2, \ldots\;.}$$

Damit ist folgendes bewiesen:

> Das Quadrat des Drehimpulsoperators $\vec{\mathbf{L}}^2$ kann die Eigenwerte
>
> $$\hbar^2 j(j+1)\;, \qquad j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \ldots\;,$$
>
> haben.
> Bei festem j kann $\hbar\mathbf{L}_3$ die $2j+1$ Werte
>
> $$\hbar m\;, \qquad m = -j, -j+1, \ldots, +j$$
>
> annehmen.

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

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

Wir setzen nun voraus, daß die $v_{j\,m}$ normiert sind und bestimmen die Matrixelemente N folgendermaßen:

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

Also

$$\boxed{\begin{aligned}
\mathbf{L}_+ v_{jm} &= \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\, v_{j\,m+1} \\
&\quad \text{und analog} \\
\mathbf{L}_- v_{jm} &= \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\, v_{j\,m-1}\;.
\end{aligned}}$$

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

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

Der Bahndrehimpuls von Elektronen hat, wie wir später zeigen werden, ganzzahlige $j = 0, 1, 2, \ldots$ (s, p, d-Wellen, etc.). Der Eigendrehimpuls (Spin) von fermionische Elementarteilchen dagegen $j = 1/2$. Wir werden uns später mit dem Spin der Elektronen noch ausführlich beschäftigen, hier nehmen wir $j = 1/2$ als Beispiel, um die Matrixlemente der Drehimpulsoperatoren bei gegebener Quantisierungsachse zu berechnen.

Pauli-Matrizen

Es gibt $2j + 1 = 2$ Eigenzustände, welche wir mit $v_{\pm\frac{1}{2}}$ bezeichnen:

$$j = \frac{1}{2}\,, \quad m = \pm\frac{1}{2}\,; \qquad v_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} \equiv v_{\frac{1}{2}}\,, \quad v_{\frac{1}{2}\,-\frac{1}{2}} \equiv v_{-\frac{1}{2}}\,,$$

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

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

$$\boxed{\frac{\mathbf{L}_3}{\hbar} \to \tilde{S}_3 = \frac{1}{2}\sigma_3\,, \qquad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\,.}$$

Ferner gilt

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

$$\mathbf{L}_- v_{-\frac{1}{2}} = 0\,, \quad \mathbf{L}_- v_{\frac{1}{2}} = \hbar\, v_{-\frac{1}{2}}\,; \qquad \frac{\mathbf{L}_-}{\hbar} \to \tilde{S}_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\,,$$

Mit

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

erhalten wir

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

Die σ_i , $i = 1, 2, 3$ heißen die *Pauli Spin–Matrizen.*

5.2.4 Bahndrehimpuls und Kugelfunktionen

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

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

Polarkoordinaten

Wir verwenden nun Polarkoordinaten,

$$x_1 \; = \; r\cos\varphi\sin\vartheta \; , \qquad x_2 \; = \; r\sin\varphi\sin\vartheta \; , \qquad x_3 \; = \; r\cos\vartheta \; .$$

Man erhält (nachrechnen, r fällt heraus!):

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

Kugelfunktionen

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

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

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

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

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 ausrechnen[1]:

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

[1]Man beachte

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

für eine beliebige differenzierbare Funktion $f(\vartheta)$!

Beispiele

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

5.2.5 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
Die Legendre-Polynome kann man auch durch ihre *erzeugende Funktion* definieren: Es sei $||\vec{y}|| < ||\vec{x}||, \ \ s = ||\vec{y}||/||\vec{x}|| < 1$, dann

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

(Entwicklung nach Multipolen).

Zugeordnete Legendre-Polynome

Die *zugeordneten Legendre–Polynome* sind definiert als

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

Die letzte Beziehung gilt auch für negative m. Wegen

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

haben wir

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

und

$$Y_{l-m} \;=\; (-1)^m Y_{lm}^*.$$

Multipolentwicklung

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

$$0 \le \vartheta \le \pi, \qquad 0 \le \varphi \le 2\pi \ .$$

Ist $f(\varphi,\vartheta)$ eine quadratintegrable Funktion auf der Einheitskugel, $(f,f) \equiv \int d\Omega\, f^* f < \infty$, 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.

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 Spektroskopkie. Sie sind Abkürzungen für “scharfe”,“prinzipielle”, “diffuse” und “feine” Linie.

5.3 Stern–Gerlach–Versuch

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

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

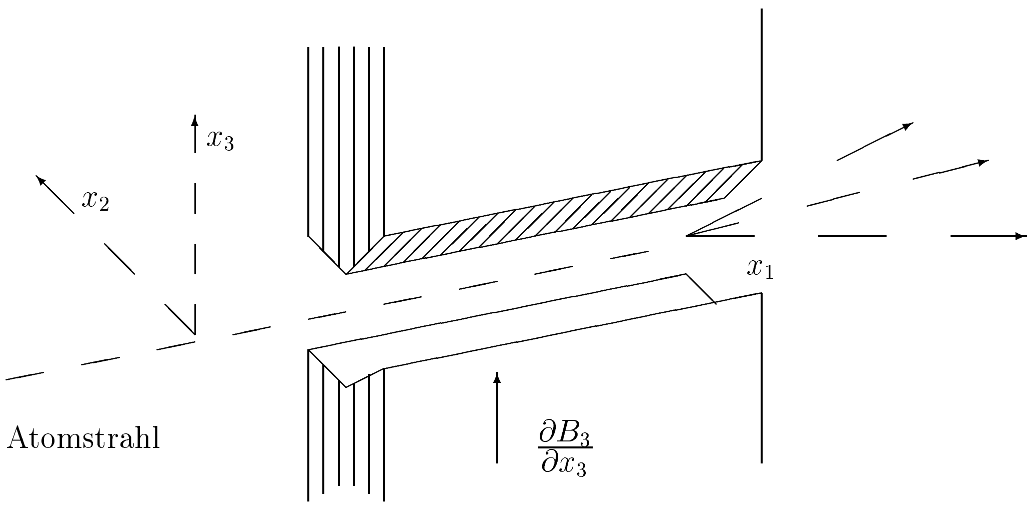
$$\boxed{\vec{\mu} \;=\; \frac{q}{2m_0}\vec{l}\;.}$$

Teilchen in einem inhomogenen Magnetfeld

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

$$\boxed{\vec{K}(\vec{x}) \;=\; \mathrm{grad}\left(\vec{\mu}\cdot\vec{B}(\vec{x})\right)}$$

ausgeübt.



Versuchsanordnung

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) $\vec{l}$ und damit das magnetische Moment $\vec{\mu} = -\frac{e_0}{2m_e}\vec{l}$, e_0: Elementarladung (> 0), haben. Dann erfahren die Elektronen (und damit die Atome) in x_3–Richtung die Kraft

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

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

$$\boxed{K_3(x_1, x_2 = 0, x_3) \;=\; \mu_3\,\partial_3 B_3\;.}$$

Aufspaltung des Bahndrehimpulses

Quantenmechanisch gilt $l_3 \to \hbar m \;, \;\; l = 0, 1, \ldots \;, \quad -l \leq m \leq l$, d. h.

$$\boxed{\mu_3 \;=\; -\frac{e_0\hbar}{2m_e} m \;, \qquad -l \leq m \leq l \;.}$$

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!

$$\boxed{\text{Die Größe } \;\mu_B \equiv \frac{e_0\hbar}{2m_e}\; \text{ heißt Bohr'sches Magneton,}}$$

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

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 2 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

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

gehört.