

Kapitel 6

Symmetrietransformationen

Besonders wichtig, nicht nur in der Quantenmechanik, sind zeitliche und räumliche Verschiebungen sowie Drehungen. Man bezeichnet sie auch als „Symmetrietransformationen“, weil das physikalische System darunter oft unverändert bleibt. Zu den Symmetrieeoperationen gehört auch die räumliche Spiegelung (Kap. 4.6.2).

6.1 Zeittranslationen

In Kapitel 3.1 haben wir den Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}(t, t_0)$ kennengelernt, der einen Zustandsvektor $|\psi(t)\rangle$ in der Zeit verschiebt:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}_\tau d\tau} |\psi(t_0)\rangle \quad (6.1)$$

Wenn der Hamiltonoperator nicht explizit von der Zeit abhängt, vereinfacht sich diese Beziehung zu

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \cdot (t-t_0)} |\psi(t_0)\rangle \quad (6.2)$$

Man nennt den Hamiltonoperator deswegen den Erzeuger der Zeittranslation. Der Zeittranslationsoperator \hat{U} muss unitär sein, damit die Norm von $|\psi\rangle$ erhalten bleibt, d.h. damit sich die Gesamtwahrscheinlichkeit, ein Teilchen irgendwo zu finden, nicht ändert. Daraus folgt, dass \hat{H} hermitesch sein muss.

6.2. Zu Lie-Gruppen

Per Konstruktion ist die Operation der Zeittranslation linear im Zustandsvektor $|\psi\rangle$, und sie hat die Struktur einer Gruppe:

$$\hat{U}(t_2, t_1) \hat{U}(t_1, t_0) = \hat{U}(t_2, t_0). \quad (6.3)$$

Wenn der Hamiltonoperator nicht explizit von der Zeit abhängt, dann ist kein Zeitpunkt gegenüber einem anderen ausgezeichnet. Das physikalische System verhält sich dann zu jedem Zeitpunkt gleichartig; es ist zeittranslationsinvariant. Wir haben in Kap. 3.4 gesehen, dass dann die Energie zeitlich erhalten ist:

$$\begin{aligned} \langle \psi(t) | \hat{H} | \psi(t) \rangle &= \langle \psi(t_0) | e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} (t-t_0)} \hat{H} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} (t-t_0)} | \psi(t_0) \rangle \\ &= \langle \psi(t_0) | \hat{H} | \psi(t_0) \rangle \end{aligned}$$

Dies ist ein Spezialfall des Noetherschen Theorems: Zu jeder kontinuierlichen Invarianz eines Systems gehört eine Erhaltungsgröße (s.u.).

6.2 Zu Lie-Gruppen

Wir werden im Folgenden räumliche Translationen und Drehungen behandeln. Wir werden sehen, dass die zugehörigen Operatoren genauso wie bei Zeittranslationen von der Gestalt

$$\hat{G}(c) = e^{-\frac{i}{\hbar} c \hat{A}} \quad (6.4)$$

sind, mit einem hermiteschen Erzeuger \hat{A} und einem (oder mehreren) kontinuierlichen reellen Parameter(n) c .¹ Da \hat{A} hermitesch ist, sind diese Operatoren unitär. Operatoren dieser Gestalt sind kontinuierlich mit dem Einheitsoperator verbunden (im Gegensatz zur räumlichen Spiegelung) und sie haben Gruppeneigenschaften. Die zugehörigen Gruppen nennt man Lie-Gruppen, und die Erzeuger sind Elemente der zugehörigen Lie-Algebra, mit jeweils charakteristischen Vertauschungsrelationen. Die Eigenschaften solcher Gruppen kann man schon an Hand von infinitesimalen Operationen ($|c| \ll 1$)

$$\hat{G}(c) = \hat{1} - \frac{i}{\hbar} c \hat{A} + \frac{1}{2\hbar^2} (c \hat{A})^2 + \dots$$

¹Die Namen \hat{G} , \hat{A} , c sind hier frei gewählt; es gibt dazu keine allgemeine Konvention.

untersuchen, wobei es reicht, lediglich bis zur 2. Ordnung in c zu entwickeln.

Auch die Rotation von Spins wird über einen solchen Operator beschrieben, nämlich $e^{-\frac{i}{\hbar} \varphi \vec{n} \cdot \vec{S}}$ (s.u.), mit der Lie-Gruppe „ $SU(2)$ “, das ist die Gruppe der unimodularen (Determinante=1) unitären Operatoren in 2 Dimensionen. Räumliche Drehungen von normalen Vektoren gehören zu Symmetriegruppe $SO(3)$ (s.u.). Weitere analoge Symmetriegruppen spielen in der Relativitätstheorie und in der Elementarteilchenphysik eine große Rolle, z.B. die Symmetriegruppe $SU(3)$ in der Quantenchromodynamik.

1.6.2023

6.3 Noethersches Theorem

Wir nehmen im Folgenden an, dass weder der Hamiltonoperator \hat{H} noch der Erzeuger \hat{A} einer Transformation $\hat{G}(c) = e^{-\frac{i}{\hbar} c \hat{A}}$ explizit von der Zeit abhängen.

Unter der Transformation \hat{G} werden Zustände $|\psi\rangle$ gemäß

$$|\psi\rangle \rightarrow \hat{G} |\psi\rangle$$

transformiert. Die physikalischen Matrixelemente wie $\langle \psi | \hat{G}^\dagger \hat{B} \hat{G} | \psi \rangle$ bleiben dieselben, wenn man stattdessen die Zustände unverändert lässt und alle Operatoren transformiert (s. Gl. (A.52), Gl. (A.54)). Ein beliebiger Operator \hat{B} transformiert sich bei diesem Zugang gemäß

Observable B

$$\hat{B} \rightarrow \hat{B}' = \hat{G}^\dagger \hat{B} \hat{G} \tag{6.5}$$

$$\begin{aligned} &= \left(\hat{1} + \frac{i}{\hbar} c \hat{A} + \dots \right) \hat{B} \left(\hat{1} - \frac{i}{\hbar} c \hat{A} + \dots \right) \\ &= \hat{B} + \frac{i}{\hbar} c [\hat{A}, \hat{B}] + O(c^2), \end{aligned} \tag{6.6}$$

wobei in „ $O(c^2)$ “ höhere Kommutatoren enthalten sind (Baker-Hausdorff-Formeln). Das betrachtete physikalische System ist durch seinen Hamiltonoperator charakterisiert. Es ist invariant unter der Transformation \hat{G} , wenn sich der Hamiltonoperator bei der Transformation nicht ändert. Wegen Gl. (6.5) und (6.6) ist dies (mit der Wahl $\hat{B} = \hat{H}$) äquivalent zu

(mit Kommut. von A und B)



$$[\hat{A}, \hat{H}] = 0, \tag{6.7}$$

6.4. Räumliche Translationen

d.h. der Hamiltonoperator vertauscht dann mit dem Erzeuger \hat{A} der Transformation. Mit der Heisenbergschen Bewegungsgleichung Gl. (3.50) folgt

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}] = 0 \quad \Rightarrow \quad \langle \hat{A} \rangle \text{ const.}$$

und man erhält das

NOETHERSCHE THEOREM

Wenn ein System unter Transformationen $\hat{G} = e^{-\frac{i}{\hbar} c \hat{A}}$ invariant ist, d.h. wenn sich der Hamiltonoperator unter dieser Transformation nicht ändert, dann kommutiert \hat{H} mit dem Erzeuger \hat{A} , und \hat{A} ist zeitlich erhalten, d.h. sein Erwartungswert und seine Matrixelemente ändern sich zeitlich nicht.

Dies gilt auch umgekehrt: wenn $[\hat{A}, \hat{H}] = 0$, dann ist das System unter der von \hat{A} erzeugten Transformation invariant.

Die wichtigsten Spezialfälle sind:

Zeittranslations-Invarianz \Rightarrow Energieerhaltung

Translations-Invarianz \Rightarrow Impulserhaltung

Rotations-Invarianz \Rightarrow Drehimpulserhaltung

Erzeugender Op. s.u.

s.u.

6.4 Räumliche Translationen

6.4.1 Translationsoperator

Wir definieren den räumlichen Translationsoperator über seine Wirkung auf einen Zustand $|x\rangle$:

TRANSLATIONSOPERATOR

$$\hat{T}_{\vec{a}} |\vec{x}\rangle := |\vec{x} + \vec{a}\rangle. \quad (6.8)$$

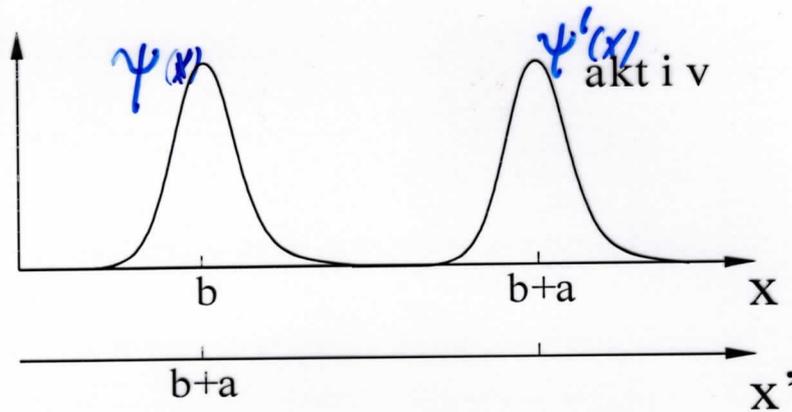


Abbildung 6.1: Aktive Transformation eines Zustands und passive Koordinatentransformation. (s.a. Kap. A.3.10 und A.3.11)

Er transformiert den Zustand eines Teilchens mit Position \vec{x} in einen Zustand mit Position $\vec{x} + \vec{a}$, entspricht somit einer aktiven Transformation am Teilchen. Die Wellenfunktion ändert sich dabei wie folgt (der Einfachheit halber eindimensional):

$$\begin{aligned}
 \psi'(x) &:= \hat{T}_a \psi(x) := \langle x | \hat{T}_a | \psi \rangle \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} dy \langle x | \hat{T}_a | y \rangle \langle y | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dy \underbrace{\langle x | y + a \rangle}_{\delta(y+a-x)} \underbrace{\langle y | \psi \rangle}_{\psi(y)} \\
 &= \psi(x - a).
 \end{aligned}
 \tag{6.9}$$

Wenn die Wellenfunktion $\psi(\vec{x})$ ein Maximum an der Stelle $\vec{x} = \vec{b}$ hat, dann hat die transformierte Wellenfunktion $\psi'(\vec{x})$ ein Maximum bei $\vec{x} = \vec{b} + \vec{a}$, entsprechend der aktiven Transformation um die Strecke \vec{a} (siehe Abb.). (Im Gegensatz dazu wird bei einer *passiven* Transformation das *Koordinatensystem* verschoben, statt des Teilchens, d.h. $\vec{x}' = \vec{x} + \vec{a}$, und für die Wellenfunktion ψ' nach der Transformation gilt $\psi'(\vec{x}') = \psi(\vec{x})$.)

Den Operator der räumlichen Translation kann man über die inverse Fou-

6.4. Räumliche Translationen

riertransformation umschreiben (Notation eindimensional):

$$\begin{aligned}
 \hat{T}_a \psi(x) &= \psi(x-a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-a)} \tilde{\psi}(k) dk \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ika} e^{ikx} \tilde{\psi}(k) dk \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-a \frac{d}{dx}} e^{ikx} \tilde{\psi}(k) dk \quad \text{(s.a. S. A62)} \\
 &\quad \text{über Potenzreihe def.} \quad \checkmark \\
 &= e^{-a \frac{i\hbar}{\hbar} \frac{d}{dx}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \tilde{\psi}(k) dk \\
 &= e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{P}_x a} \psi(x), \quad \rightarrow \text{Taylorreihe (6.10)} \\
 &\quad \text{für } \psi(x-a)! \checkmark
 \end{aligned}$$

somit (wieder dreidimensional)

$$\begin{aligned}
 \hat{T}_{\vec{a}} &= e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{P} \vec{a}} \\
 &\equiv e^{-\frac{i}{\hbar} (\hat{P}_x a_x + \hat{P}_y a_y + \hat{P}_z a_z)} \\
 &= e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{P}_x a_x} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{P}_y a_y} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{P}_z a_z}
 \end{aligned} \quad (6.11)$$

Die Exponentialfunktion faktorisiert hier, weil $\hat{P}_x, \hat{P}_y, \hat{P}_z$ alle miteinander vertauschen. Wir sehen: der Erzeuger der räumlichen Translationen ist der Impulsoperator! Er ist unitär, weil \hat{P} hermitesch ist. Es gilt daher

$$\hat{T}_{\vec{a}}^\dagger = \hat{T}_{\vec{a}}^{-1} \quad \Rightarrow \quad \langle \vec{x} | \hat{T}_{\vec{a}} = \langle \vec{x} - \vec{a} |. \quad (6.12)$$

Die letzte Beziehung folgt auch direkt aus $\psi(x-a) = \hat{T}_a \psi(x) \equiv \langle x | \hat{T}_a | \psi \rangle$.
Translationen bilden eine Gruppe

$$\hat{T}_{\vec{a}} \hat{T}_{\vec{b}} = \hat{T}_{\vec{a}+\vec{b}} \quad (6.13)$$

und sie kommutieren miteinander.

Die Eigenvektoren $|\vec{p}\rangle$ des Impulsoperators \hat{p} sind im Ortsraum die Fourierkoeffizienten $\langle \vec{x} | \vec{p} \rangle = e^{ikx} / (2\pi\hbar)^{3/2}$ (ebene Wellen). Die Eigenwertgleichung

chung lautet

(Unterscheiden: hquer k auf der rechten Seite ist der **Impuls**, nicht der Impulsoperator)

$$\hat{P} \frac{e^{i\vec{k}\vec{x}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} = \hbar\vec{k} \frac{e^{i\vec{k}\vec{x}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \quad (6.14)$$

Sie sind auch die Eigenfunktionen des Translationsoperators

$$\hat{T}_{\vec{a}} \frac{e^{i\vec{k}\vec{x}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{P}\vec{a}} \frac{e^{i\vec{k}\vec{x}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} = e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{a}} \frac{e^{i\vec{k}\vec{x}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \quad (6.15)$$

mit den Eigenwerten $e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{a}}$ (und $\vec{p} = \hbar\vec{k}$).

Ein durch einen Hamiltonoperator \hat{H} beschriebenes physikalisches System ist translationsinvariant, wenn der Translationsoperator mit \hat{H} kommutiert, d.h. genau dann, wenn \hat{H} mit \hat{P} kommutiert.

$$[\hat{H}, \hat{T}_{\vec{a}}] = 0 \quad \Leftrightarrow \quad [\hat{H}, \hat{P}] = 0. \quad (6.16)$$

Dann gibt es ein gemeinsames System von Eigenfunktionen von \hat{H} und \hat{P} . Der Zeitentwicklungsoperator $e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$ ändert diese Eigenfunktionen nur um einen Phasenfaktor. In einem translationsinvarianten System ist daher der räumliche Impuls \vec{p} eine Erhaltungsgröße!

6.4.2 Blochsches Theorem

Die Translationsinvarianz eines Systems hat auch dann physikalische Konsequenzen, wenn sie nicht für beliebige kontinuierliche Translationen gilt, sondern, wie in einem unendlich großen regelmäßigen Kristall, nur für Vielfache eines Gittervektors \vec{a} .

Wir betrachten der Einfachheit halber nur 1 Dimension. Ein Teilchen der Masse m befinde sich in einem gitterperiodischen Potential

$$V(x) = V(x + a)$$

mit dem Gitterabstand $a > 0$.² Behauptung: Der Hamiltonoperator $\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \hat{V}$ vertauscht dann mit dem Operator der Translation um dem Abstand a (und ganzzahlige Vielfache davon):

$$[\hat{H}, \hat{T}_a] = 0.$$

²Die Verwendung einer Funktion $V(x)$ impliziert, dass der Operator \hat{V} der potentiellen Energie wie auch schon zuvor diagonal im Ortsraum ist, $\langle x | \hat{V} | y \rangle = V(x) \delta(x - y)$, d.h. durch ihn wird das Teilchen nicht im Ort verschoben.

$\langle x | y \rangle$

6.4. Räumliche Translationen

Beweis: Es gilt $[\hat{P}^2, \hat{T}_l] = 0$ für beliebige Abstände l , weil \hat{P} der Erzeuger von \hat{T} ist. Zur Berechnung des verbleibenden Kommutators $[\hat{V}, \hat{T}_a]$ wenden wir ihn auf einen beliebigen Zustand $|\psi\rangle$ an und werten das Ergebnis im Ortsraum aus:

$$\begin{aligned}
 \langle x | [\hat{V}, \hat{T}_a] | \psi \rangle &= \int dy |y\rangle \langle y| \\
 &= \langle x | \hat{V} \hat{T}_a | \psi \rangle - \langle x | \hat{T}_a \hat{V} | \psi \rangle \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} dy \langle x | \hat{V} | y + a \rangle \langle y | \psi \rangle - \langle x - a | \hat{V} | \psi \rangle \\
 &= V(x) \psi(x - a) - \underbrace{V(x - a)}_{=V(x)} \psi(x - a) = 0.
 \end{aligned}$$

Es gibt daher gemeinsame Eigenfunktionen zu \hat{H} und \hat{T}_a . Die Eigenfunktionen von \hat{T}_a sind die sogenannten Bloch-Funktionen

$$\Phi_q(x) = e^{iqx} f(x) \quad (6.17)$$

mit einer beliebigen periodischen Funktion f , die $f(x + a) = f(x)$ erfüllt. Die zugehörigen Eigenwerte von \hat{T}_a sind e^{iqa} . Den Wertebereich von q kann man auf einen Bereich der Länge $\frac{2\pi}{a}$, z.B. $[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]$ einschränken, da sich sonst die Funktion $\Phi_q(x)$ wiederholen würde.

Es gilt daher das Blochsche Theorem: In einem gitterperiodischen Potential $V(x) = V(x + a)$ können alle Eigenfunktionen des Hamiltonoperators durch die kontinuierliche Gitterwellenzahl $q \in [-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]$ gekennzeichnet werden (äquivalent: durch den Gitterimpuls $p = \hbar q$), und die Wellenfunktion erfüllt

$$\Phi_q(x + na) = e^{iqna} \Phi_q(x), \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (6.18)$$

Die Gitterwellenzahl beschreibt, wie sich die Phase der Wellenfunktion bei Translation um a ändert.

6.4.3 Kronig-Penney-Modell

Eine einfache Anwendung findet das Blochsche Theorem im Kronig-Penney-Modell, einem extrem vereinfachten Modell für einen Festkörper. Es wird

ein einzelnes, als unabhängig angenommenes Elektron betrachtet. Das Elektron spürt lediglich ein periodisches Delta-Potential am Ort der Atome:

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x + na). \quad (6.19)$$

Das Potential kann man als attraktiv oder repulsiv annehmen.

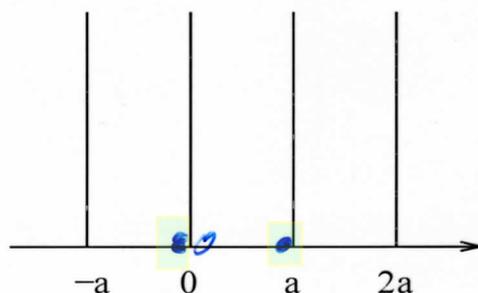
Zwischen den Atomen spürt das Elektron keine Kraft. In jedem Intervall $(na, (n+1)a)$ hat daher die Wellenfunktion die Gestalt

$$\psi(x + na) = A_n e^{ikx} + B_n e^{-ikx}, \quad 0 < x < a,$$

mit $k^2 = 2m(E)\hbar^2$. Ohne das Blochsche Theorem hätte man unendlich viele Konstanten A_n und B_n zu bestimmen. Aufgrund des Blochschen Theorems weiß man aber, dass man die Eigenfunktionen von \hat{H} nach der Gitterwellenzahl q klassifizieren kann, so dass

$$\psi(x + na) = e^{iqna} \psi(x) \quad (6.20)$$

gilt. In diesen Eigenfunktionen unterscheidet sich somit die Wellenfunktion in jedem Intervall nur um einen bekannten Phasenfaktor von der Wellenfunktion im Intervall $0 < x < a$. Deswegen bleiben nur die zwei Konstanten A_0 und B_0 im Intervall $(0, a)$ zu bestimmen. Die Stetigkeitsbedingungen bei $x = 0$ reichen dann aus, um die Konstanten in Abhängigkeit von k und q festzulegen. Dazu benötigt man $\psi(0_-) = e^{-iqa}\psi(a_-)$. Das Gleichungssystem hat aber nur dann eine Lösung, wenn die entsprechende Koeffizienten-Determinante verschwindet, woraus nach kurzer Rechnung



$$\begin{aligned} \psi(0_-) &\stackrel{!}{=} \psi(0_+) \\ \psi'(0_-) &\stackrel{!}{=} \psi'(0_+) - D \quad \checkmark \end{aligned}$$

Abbildung 6.2: Kronig-Penney-Modell.

6.4. Räumliche Translationen

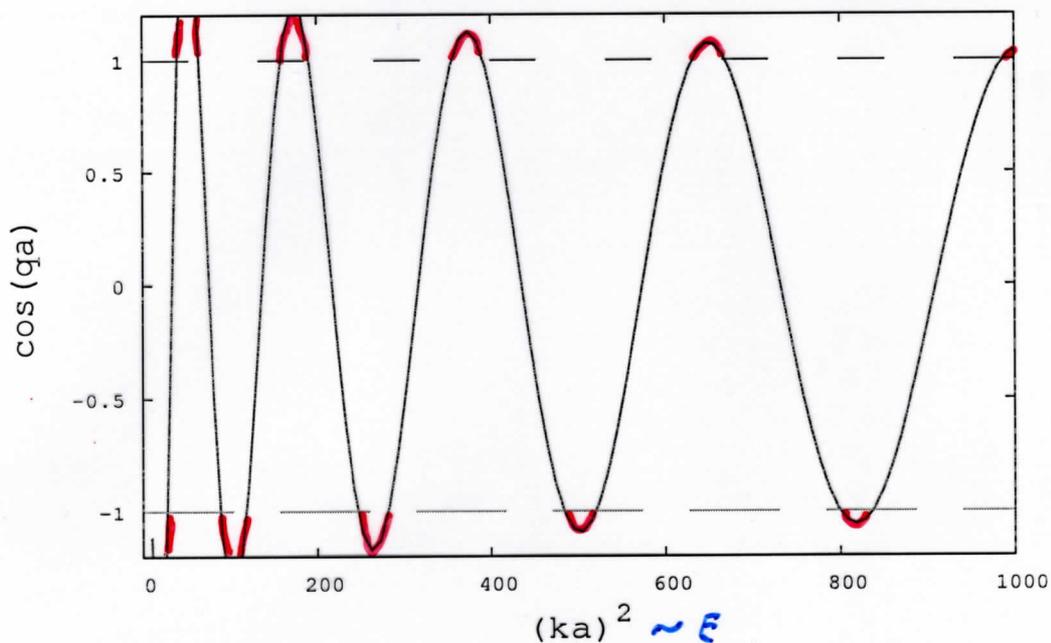


Abbildung 6.3: Kronig-Penney-Modell: $\cos(qa)$ als Funktion von $(ka)^2 \sim$ Energie, bei $Da = 10$. Es sind nur diejenigen Energien möglich, für die $\cos(qa)$ zwischen den Linien -1 und 1 liegt. Als Funktion der Gitterwellenzahl q betrachtet, erhält man so die möglichen Energiebänder.

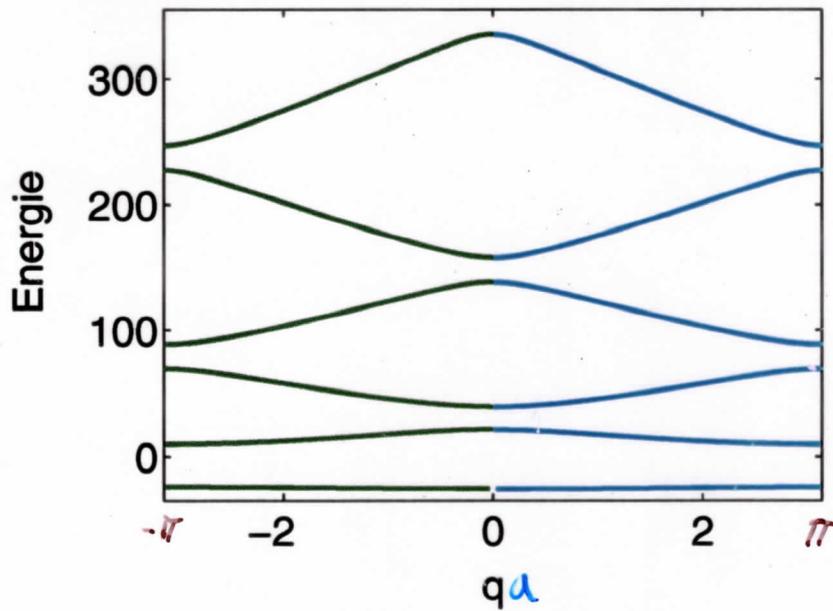
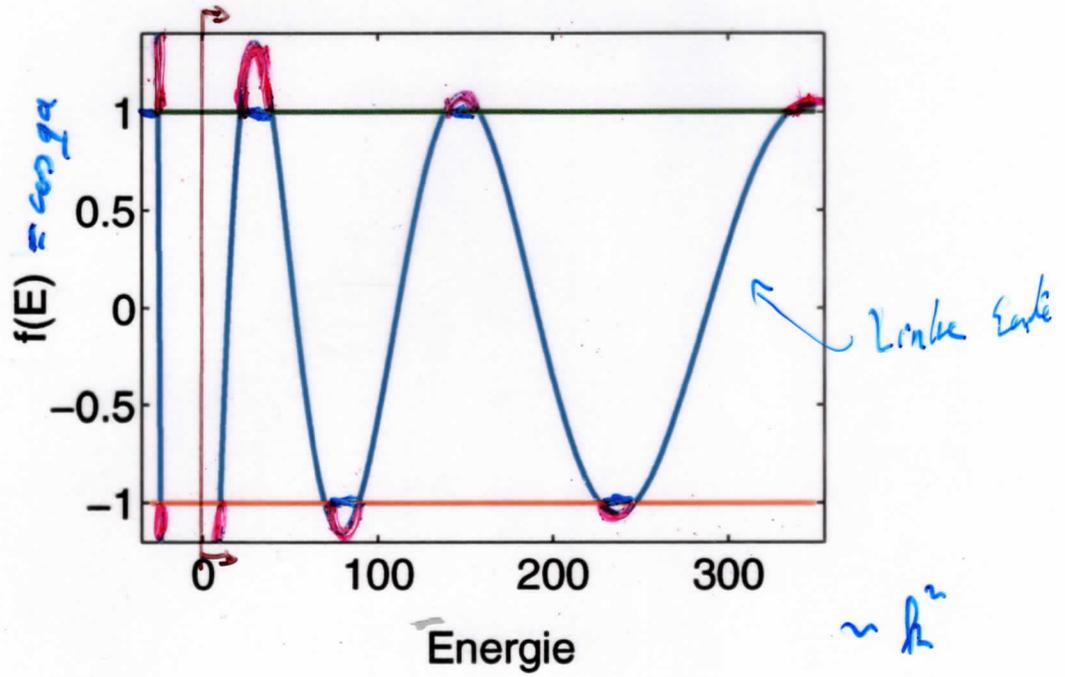
folgt

$$\cos ka + \frac{Da}{2ka} \sin ka = \cos qa \Rightarrow \left| \cos ka + \frac{Da}{2ka} \sin ka \right| \leq 1. \quad (6.21)$$

Hier tauchen nur die dimensionslosen Größen qa , ka , und Da auf.

Gl. (6.21) bedeutet eine Einschränkung für die möglichen Werte von ka und damit für die möglichen Energien $E = \hbar^2 k^2 / 2m$. Wenn man k variiert, variiert auch $\cos qa$ in Gl. (6.21). Als Funktion von q ergibt sich so ein Energieband $E = \hbar^2 k(q)^2 / 2m$. Für manche Bereiche von k ergäbe sich aber $|\cos qa| > 1$, so dass diese Wellenzahlenbereiche nicht möglich sind. Es gibt daher „erlaubte“ und „verbotene“ Energiebereiche, so wie in realen Festkörpern. Dies ist in Abb. 6.3 dargestellt. Wenn man k weiter vergrößert, gelangt man wieder in einen erlaubten Bereich, usw. Zu jeder Gitterwellenzahl q gibt es daher unendlich viele diskrete Lösungen für k . Als Funktion von q haben sie die Form von Energiebändern.

Kronig Penney Modell mit $D=10, a=1$



6.5 Drehungen

Ausgehend von der Dirac-Gleichung (der relativistischen Verallgemeinerung der Schrödingergleichung) kann man zeigen, dass bei einer Drehung um eine Drehachse \vec{n} und um einen Winkel φ der zugehörige Operator allgemein von der Form

$$\hat{R}(\vec{n}, \varphi) = e^{-\frac{i}{\hbar} \varphi \vec{n} \hat{J}} \quad (6.22)$$

ist.³ Dabei ist der Erzeuger \hat{J} der Operator des Gesamtdrehimpulses. Man muss dabei zunächst die Drehung von Spins und diejenige von „normalen“ Vektoren unterscheiden. Wir schauen uns zuerst diese beiden Spezialfälle an und behandeln dann den Drehimpuls allgemein.

6.5.1 Drehung von Spins

Den Drehoperator für die Drehung eines Teilchens mit Spin $\frac{1}{2}$ (um den Ort des Teilchens) haben wir schon implizit bei der Spin-Präzession (Kap. 3.5.3) kennengelernt, und explizit in den Übungen:

$$\hat{R}(\vec{n}, \varphi) = \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar} \varphi \vec{n} \hat{S}}}_{\in SU(2)} \xrightarrow{\text{(z-Basis)}} e^{-i \varphi \vec{n} \frac{\vec{\sigma}}{2}} = \hat{1} \cos\left(\frac{\varphi}{2}\right) - i \vec{n} \vec{\sigma} \sin\left(\frac{\varphi}{2}\right). \quad (6.23)$$

Er ist in der Tat von der Form (6.22). Der Erzeuger der Drehung ist hier der Spin-Operator \hat{S} . Bemerkenswert ist, dass bei einer Drehung um 2π der Operator \hat{R} nicht zum Einheitsoperator wird, sondern wegen des Faktors $\frac{1}{2}$ in $\vec{S} \rightarrow \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$ zu $(-\hat{1})$. Dieses Minuszeichen ist charakteristisch für halbzahlige Spins, die bei férmionischen Teilchen auftreten.

Der Spin ist ein innerer Freiheitsgrad eines Teilchens. Der Operator \hat{R} hat bei Objekten mit Spin $\frac{1}{2}$ eine 2×2 Matrixdarstellung R im Spinorraum, d.h. im Raum der Spin-Indizes.

← (Pauli-Prinzip)

³Es gibt keine allgemeine Konvention für den Namen des Drehoperators. Hier wurde \hat{R} wie Rotation willkürlich gewählt.

6.5. Drehungen

6.5.2 Bahndrehimpuls

Bei räumlichen Drehungen transformieren sich, wie aus der klassischen Mechanik gewohnt, normale dreidimensionale Vektoren gemäß

$$\underline{\vec{x}'} = R \vec{x}. \quad (6.24)$$

Hier ist R eine 3×3 Matrix, z.B. lautet die Drehmatrix für eine Drehung um die z -Achse

$$R_z(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \underline{\text{ESO}(3)} \quad (6.25) \quad \checkmark$$

(Diese Matrix kann man auch analog zu (6.22) schreiben:

$$R_z(\varphi) = e^{-i\varphi A_z} \quad \text{mit} \quad A_z = i \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad !$$

wie man leicht durch Reihenentwicklung der Exponentialfunktion sieht.)

Bei kleinem Winkel φ erhält man in 1. Ordnung

$$x' = x - \varphi y, \quad y' = y + \varphi x, \quad z' = z. \quad (6.26)$$

Wir betrachten nun ein Teilchen ohne Spin. Bei einer aktiven Translation eines Teilchens von der Position \vec{x} zur Position $\vec{x} + \vec{a}$ hatten wir in (6.9) schon festgestellt, dass sich die Wellenfunktion dann gemäß $\psi'(\vec{x}) = \psi(\vec{x} - \vec{a})$ (mit dem umgekehrten Vorzeichen von \vec{a}) transformiert. Bei einer Drehung eines Teilchens um einen infinitesimalen Winkel φ wird die Wellenfunktion analog zu

$$\begin{aligned} \underline{\psi'(\vec{x})} &= \langle (R^{-1}\vec{x}) | \psi \rangle = \psi(x + \varphi y, y - \varphi x, z) \\ &= \left(1 + \varphi y \frac{\partial}{\partial x} - \varphi x \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi(x, y, z) \\ &=: \underline{\left(1 - \frac{i}{\hbar} \varphi \hat{L}_z \right)} \psi(x, y, z), \quad (6.27) \end{aligned}$$

entsprechend der infinitesimalen Form von (6.22), wobei $\hat{L}_z \psi(\vec{x}) \equiv \langle \vec{x} | \hat{L}_z | \psi \rangle$. In der letzten Zeile haben wir die z-Komponente \hat{L}_z des Bahndrehimpulsoperators $\hat{\vec{L}}$ eingeführt. Die hier auftretenden Ableitungen kann man auch mittels Impulsoperatoren schreiben:

$$\hat{L}_z = x \hat{p}_y - y \hat{p}_x. \quad (6.28)$$

Die Komponenten \hat{L}_x und \hat{L}_y erhält man analog. Denselben Operator findet man auch über das Korrespondenzprinzip als quantenmechanische Variante des klassischen Drehimpulses (!):

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \rightarrow \hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}.$$

Der erzeugende Operator von räumlichen Drehungen bei Teilchen ohne Spin ist somit der

BAHDREHIMPULSOPERATOR

$$\begin{aligned} \hat{\vec{L}} &= \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} \\ \hat{L}_\alpha &= \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{r}_\beta \hat{p}_\gamma \end{aligned} \quad (6.29)$$

mit einer implizierten Summe über γ in der zweiten Zeile. Hier kommt es wegen der Antisymmetrie des ε -Tensors nicht auf die Reihenfolge von \hat{r}_β und \hat{p}_γ an, da nur vertauschende Komponenten aufeinandertreffen. Die Komponenten \hat{L}_α des Bahndrehimpulsoperators sind hermitesch.

6.5.3 Gesamtdrehimpuls und Vertauschungsrelationen

Der Operator des Gesamtdrehimpulses ist

$$\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}} \quad (\text{alle Operatoren hier sind hermitesch}) \quad (6.30)$$

mit dem Drehoperator Gl. (6.22). Dies folgt im Rahmen der relativistischen Quantenmechanik, ebenso wie Existenz eines Spins mit Größe $\hbar/2$, direkt aus dem Transformationsverhalten der Dirac-Gleichung ! In der nichtrelativistischen Quantenmechanik müssen dagegen die Existenz des Spins sowie (6.30) zusätzlich zur Schrödingergleichung postuliert werden.

!

$\hat{R} = e^{-\frac{i}{\hbar} \varphi \hat{L}_z}$ ✓

Dirac-Gleichung: beschreibt Fermionen z.B. Elektronen

6.5. Drehungen

wirkt im Ortsraum

Bei einem Teilchen ohne Spin hat der Operator \hat{S} keine Wirkung; dann ist \hat{L} der gesamte Drehimpulsoperator. Analog hat der Bahndrehimpulsoperator bei Drehung um den Ort eines punktförmigen Teilchens keine Wirkung, und \hat{S} ist dort der gesamte Drehimpulsoperator.

↑ wirkt auf Spin-(Beschreibung)

Drehungen um verschiedene Achsen vertauschen nicht miteinander. Aus (6.29) kann man leicht

$$[\hat{L}_\alpha, \hat{L}_\beta] = i\hbar \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{L}_\gamma$$

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

herleiten. Die gleiche Relation hatten wir früher auch schon für die Spin- $\frac{1}{2}$ -Operatoren kennengelernt, in der Form von

$$[\frac{\hbar}{2}\sigma_i, \frac{\hbar}{2}\sigma_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \frac{\hbar}{2}\sigma_k,$$

was direkt aus $\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij}\hat{1} + i\varepsilon_{ijk}\sigma_k$ folgt. Sie gilt allgemein für Drehimpulsoperatoren: $(\hat{J}, \hat{L}, \hat{S})$

VERTAUSCHUNGSRELATIONEN VON DREHIMPULSOPERATOREN

$$[\hat{J}_\alpha, \hat{J}_\beta] = i\hbar \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{J}_\gamma$$

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar \hat{J}_z \quad (6.31)$$

(mit einer implizierten Summe über γ). Man kann diese Gleichung auch in der Form

$$\hat{J} \times \hat{J} = i\hbar \hat{J} \quad |2$$

(6.32)

z.B. $J_x J_y = i\hbar J_z$

schreiben. Die Komponenten \hat{J}_α sind, wie auch die Bahndrehimpulsoperatoren und die Spinoperatoren, hermitesch.

Operatoren \hat{A} , die mit \hat{J} vertauschen, nennt man

Gesamt Drehimpuls

SKALARE OPERATOREN

$$[\hat{J}, \hat{A}] = 0.$$

(6.33)

Sie sind invariant unter Rotationen, d.h. (6.5) $\hat{R}^\dagger \hat{A} \hat{R} = \hat{A}$. Insbesondere gilt dies für den Hamiltonoperator \hat{H} eines Elektrons in einem Zentralpotential, z.B. dem Wasserstoffatom.

=> gleichzeitig diagonalisierbar

=> Eigenfunktionen von (Vektor) J sind dann auch Eigenfunktionen von H

Operatoren $\vec{\hat{A}}$ mit drei Komponenten \hat{A}_β , die mit $\vec{\hat{J}}$ die gleichen Vertauschungsrelationen wie die Komponenten des Vektors \vec{J}_β haben, nennt man

“VEKTOROPERATOREN”

$$[\hat{J}_\alpha, \hat{A}_\beta] = i\hbar \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{A}_\gamma. \quad (6.34)$$

Sie transformieren sich wie dreidimensionale Vektoren. Ein Beispiel ist der Ortsoperator $\vec{\hat{Q}}$ und $\vec{\hat{P}}$.

$\hookrightarrow \hat{Q}_x = \hat{Q}_y \text{ oder } \hat{Q}_z \text{ oder } \hat{Q}_x$

6.5.4 Eigenwertproblem von Drehimpulsoperatoren

Wir behandeln in diesem Abschnitt allgemein das Eigenwertproblem von Drehimpulsoperatoren, basierend nur auf den Vertauschungsrelationen (6.31). \Rightarrow Gilt auch für \vec{L} bzw. \vec{S} !

Durch Einsetzen sieht man, dass $\hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$ mit jeder Komponente \hat{J}_α von $\vec{\hat{J}}$ vertauscht, während die \hat{J}_α untereinander nicht vertauschen. Man kann daher \hat{J}^2 gleichzeitig mit einer Komponente \hat{J}_α diagonalisieren. Dafür nimmt man üblicherweise \hat{J}_z . Wenn der Hamiltonoperator rotationsinvariant ist, kommutiert er ebenfalls mit \hat{J}^2 und \hat{J}_z . Man kann dann seine Eigenzustände nach den Eigenwerten von \hat{J}^2 und \hat{J}_z klassifizieren, z.B. beim Wasserstoffatom, was auch die Rechnung erheblich vereinfacht.

Die Eigenwertgleichung von \hat{J}^2 und \hat{J}_z kann man allgemein in der Form

$$\hat{J}^2 |j, m\rangle = \hbar^2 a_j |j, m\rangle$$

$$\hat{J}_z |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle$$

$\hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$

schreiben. Dabei sind die Zahlen a_j und m zunächst noch beliebig.

Leiteroperatoren

Für die Eigenwerte können wir nun ähnliche Überlegungen anstellen wie beim harmonischen Oszillator. Wir definieren dazu die

6.5. Drehungen

LEITEROPERATOREN

$$\hat{J}_{\pm} := \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y, \quad (6.35)$$

wobei offensichtlich $\hat{J}_{\pm}^{\dagger} = \hat{J}_{\mp}$. Daraus lassen sich die Drehimpulsoperatoren in kartesischen Koordinaten zurückgewinnen

$$\begin{aligned} \hat{J}_x &= \frac{(\hat{J}_+ + \hat{J}_-)}{2} \\ \hat{J}_y &= \frac{(\hat{J}_+ - \hat{J}_-)}{2i} \end{aligned}$$

5.6.2023

Die Vertauschungsrelationen für die neuen Operatoren lauten (Beweis durch Einsetzen)

$$\begin{aligned} [\hat{J}_z, \hat{J}_{\pm}] &= \pm\hbar\hat{J}_{\pm} \\ [\hat{J}_+, \hat{J}_-] &= 2\hbar\hat{J}_z \\ [\hat{J}^2, \hat{J}_{\pm}] &= 0 \end{aligned} \quad (6.36)$$

Die \hat{J}_{\pm} sind Leiteroperatoren, da sie die Quantenzahl m um ± 1 ändern:

$$\hat{J}_z (\hat{J}_{\pm} |j, m\rangle) = \hat{J}_{\pm} \underbrace{\hat{J}_z |j, m\rangle}_{m\hbar|j, m\rangle} + \underbrace{[\hat{J}_z, \hat{J}_{\pm}] |j, m\rangle}_{\pm\hbar\hat{J}_{\pm} |j, m\rangle} \quad (6.37)$$

$$= \hbar(m \pm 1) (\hat{J}_{\pm} |j, m\rangle) \quad (6.38)$$

\hat{J}_{\pm} ändert nicht a_j , den Eigenwert von \hat{J}^2 , da $[\hat{J}^2, \hat{J}_{\pm}] = 0$, d.h.

$$\hat{J}^2 (\hat{J}_{\pm} |j, m\rangle) = \hat{J}_{\pm} \hat{J}^2 |j, m\rangle = \hbar^2 a_j (\hat{J}_{\pm} |j, m\rangle) \quad (6.39)$$

und somit ist $\hat{J}_{\pm} |j, m\rangle$ Eigenvektor von \hat{J}^2 zum unveränderten Eigenwert $\hbar^2 a_j$. Daraus folgt

$$\hat{J}_{\pm} |j, m\rangle = C_{m\pm} |j, m \pm 1\rangle \quad (6.40)$$

Die Proportionalitätskonstanten $C_{m\pm}$ werden später über die Normierung bestimmt.

Das einfachste Beispiel für Leiteroperatoren sind die Spin- $\frac{1}{2}$ -Operatoren

$$\hat{S}_{\pm} := \hat{S}_x \pm i \hat{S}_y \tag{6.41}$$

$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \hbar & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hbar \\ 0 \end{pmatrix}$
 $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \hbar & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \hbar \end{pmatrix}$

In der z -Darstellung wird daraus $\frac{\hbar}{2} (\sigma_x \pm i \sigma_y)$, d.h. die Matrizen $\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \hbar & 0 \end{pmatrix}$ und $\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \hbar & 1 \end{pmatrix}$. Daraus sieht man sofort die Leiternatur dieser Operatoren, nämlich dass $\hat{S}_+ | -z \rangle = | +z \rangle$ und $\hat{S}_- | +z \rangle = | -z \rangle$ gilt.

$\hat{S}_- | -z \rangle = 0$
 $\hat{S}_+ | +z \rangle = 0$

Kann \hat{J}_{\pm} beliebig oft angewendet werden wie beim harmonischen Oszillator? Die Antwort ist nein, wie die folgenden Überlegungen zeigen. Zuerst beachte man, dass der Operator

$$\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 \geq 0 \tag{Erwartungswerte nicht negativ}$$

nicht-negativ ist. Daher gilt

$$\langle j, m | (\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2) | j, m \rangle = \hbar^2 (a_j - m^2) \geq 0 \Rightarrow a_j \geq m^2 \tag{6.42}$$

Wir haben also folgende Bedingungen:

1. $a_j \geq 0$, weil $\langle \psi | \hat{J}^2 | \psi \rangle \geq 0$,
2. $|m| \leq \sqrt{a_j}$

Damit $\hat{J}_+ | j, m \rangle$ nicht zu zu großen, unerlaubten m -Werten führt, muss ein maximales m_{max} (abhängig von j) existieren, für das gilt

$$\hat{J}_+ | j, m_{max} \rangle \stackrel{!}{=} 0 \tag{6.43}$$

Um m_{max} zu bestimmen, formen wir zunächst den Operator $\hat{J}_- \hat{J}_+$ um:

$$\hat{J}_- \hat{J}_+ = (\hat{J}_x - i \hat{J}_y)(\hat{J}_x + i \hat{J}_y) = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + i \underbrace{[\hat{J}_x, \hat{J}_y]}_{i \hbar \hat{J}_z} = \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar \hat{J}_z \tag{6.44}$$

Dann gilt

$$0 \stackrel{!}{=} \hat{J}_- \hat{J}_+ | j, m_{max} \rangle = \hbar^2 (a_j - m_{max}^2 - m_{max}) | j, m_{max} \rangle$$

also

$$\underline{a_j = m_{max}(m_{max} + 1)} \tag{6.45}$$

6.5. Drehungen

Wegen (6.45) bestimmt m_{max} den Eigenwert a_j eindeutig. Wir können deshalb m_{max} mit der Quantenzahl j identifizieren:

$$m_{max} = j \quad \text{d.h.} \quad a_j = j(j+1) \quad (6.46)$$

Analog muss ein m_{min} existieren, mit

$$\hat{J}_- |j, m_{min}\rangle = 0.$$

Ähnliche Überlegungen wie oben führen zu

$$\hat{J}_+ \hat{J}_- = \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 + \hbar \hat{J}_z \quad (6.47)$$

und schließlich zu

$$a_j = m_{min}(m_{min} - 1) \quad (6.48)$$

Kombiniert man (6.45) mit (6.48), so erhält man.⁶ $a_j = (-j)(-j-1) = j(j+1) = a_j$

$$m_{min} = -j \quad (6.49)$$

Startet man also von $|j, m_{min}\rangle$ und wendet man wiederholt \hat{J}_+ an, so erhält man (siehe (6.40))

$$\overbrace{\hat{J}_+ \cdots \hat{J}_+}^{n \text{ Mal}} |j, m_{min}\rangle \propto |j, m_{min} + n\rangle. \quad (6.50)$$

Das geht solange, bis man $|j, m_{max}\rangle = |j, j\rangle$ erreicht, dann vernichtet das nächste \hat{J}_+ , gemäß (6.43), den Zustand. Damit genau $|j, j\rangle$ erreicht wird, muss $j - m_{min} = j - (-j) = 2j$ ganzzahlig sein. Außerdem gilt $j \geq 0$ wegen $m_{max} = j, m_{min} = -j$. Daher muss gelten:

$$j = \frac{n}{2} \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (6.51)$$

Die Quantenzahl j ist somit halbzahlig oder ganzzahlig. Insgesamt erhalten wir

EIGENWERTE UND EIGENVEKTOREN DER DREHIMPULSOPERATOREN

$$\hat{J}^2 |j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle \quad (6.52a)$$

$$\hat{J}_z |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle \quad (6.52b)$$

⁶Eine zweite formale Lösung $m_{min} = j + 1$ wäre größer als m_{max} .

Symbol	Name	Wertebereich
j	Drehimpulsquantenzahl	$j = \frac{n}{2} \quad n \in \mathbb{N}_0$
m	magnetische Quantenzahl	$m \in \{-j, -j+1, \dots, j-1, j\}$

Tabelle 6.1: Quantenzahlen des Drehimpulsoperators.

Die Bezeichnung und erlaubten Werten dieser Quantenzahlen sind in der Tabelle zusammengefasst. Dieses Ergebnis ist allgemein und hängt nur von den Vertauschungsrelationen (6.31) ab.

In einem Eigenzustand $|j, m\rangle$ von \hat{J}^2 und J_z ist der Erwartungswert von \hat{J}_x und \hat{J}_y Null, denn aus $\hat{J}_{x,y} = (\hat{J}_+ \pm \hat{J}_-)/2$ folgt

$$\langle j, m | \hat{J}_{x,y} | j, m \rangle = \frac{1}{2} \langle j, m | \hat{J}_+ | j, m \rangle \pm \frac{1}{2} \langle j, m | \hat{J}_- | j, m \rangle = 0, \quad (6.53)$$

da $|j, m\rangle$ und $|j, m \pm 1\rangle$ orthogonal sind.

Die Unschärfen von \hat{J}_x und \hat{J}_y erhält man aus

$$\langle j, m | \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 | j, m \rangle = \langle j, m | \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 | j, m \rangle = \hbar^2 (j(j+1) - m^2). \quad (6.54)$$

$\geq \hbar^2 j$
 ≥ 0

Aus Symmetriegründen müssen beide Unschärfen gleich sein

Andere Rechnung: siehe Übungen

$$(\Delta J_x)^2 = (\Delta J_y)^2 = \hbar^2 (j(j+1) - m^2) / 2. \quad (6.55) \quad \checkmark$$

Sie erfüllen die Unschärferelation, denn mit $m \leq j$ gilt

$$\Delta J_x \Delta J_y - \frac{\hbar}{2} |\langle \hat{J}_z \rangle| = \frac{\hbar^2}{2} (j(j+1) - m^2 - m) = \frac{\hbar^2}{2} (j(j+1) - m(m+1)) \geq 0. \quad \checkmark$$

(6.56)

$$\Delta \hat{A} \Delta \hat{B} \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle| \quad (A.160)$$

Interessant ist auch, dass die rechte Seite von (6.54) immer größer als Null ist (außer bei $j = 0$). Somit kann $\langle \hat{J}_z^2 \rangle$ nie $\langle \hat{J}^2 \rangle$ erreichen, d.h. der Drehimpuls lässt sich nicht vollständig „ausrichten“. Eine Ausnahme stellt der Zustand mit $j = 0$ dar, da dann $\hat{J}_\alpha |0, 0\rangle = 0$ für alle α .

⁴Eine zweite formale Lösung $m_{min} = j + 1$ wäre größer als m_{max} .

6.5. Drehungen

Normierung

Als nächstes bestimmen wir die Proportionalitätskonstanten $C_{m\pm}$ in (6.40) aus der Normierung (wir benutzen (6.44) und (6.47))

$$\langle j, m | \hat{J}_{\pm}^{\dagger} \hat{J}_{\pm} | j, m \rangle \stackrel{!}{=} |C_{m\pm}|^2 \underbrace{\langle j, m \pm 1 | j, m \pm 1 \rangle}_{=1}$$

$$\begin{aligned} |C_{m\pm}|^2 &= \langle j, m | \hat{J}_{\mp} \hat{J}_{\pm} | j, m \rangle = \langle j, m | (\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 \mp \hbar \hat{J}_z) | j, m \rangle \\ &= \hbar^2 (j(j+1) - m^2 \mp m) = \hbar^2 (j(j+1) - m(m \pm 1)) \end{aligned}$$

Wir finden $C_{m\pm} = 0$ für $m = \pm j$, konsistent mit (6.46) und (6.49).

Die Phase der $C_{m\pm}$ ist beliebig. Per Konvention wird $C_{m\pm}$ reell und positiv gewählt. Wir erhalten somit das wichtige Ergebnis

$$\hat{J}_{\pm} | j, m \rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} | j, m \pm 1 \rangle \quad (6.57)$$

Mit Hilfe von (6.57) kann man, ausgehend von $|j, -j\rangle$ (oder von einem beliebigen $|j, m_0\rangle$) alle andere $|j, m\rangle$ explizit konstruieren.

Wir haben die möglichen Eigenwerte von \hat{J}^2 aus der Kommutatoralgebra abgeleitet. Das heißt aber noch nicht, dass in der Natur alle Werte von j tatsächlich realisiert sind. Insbesondere entspricht $j = \frac{1}{2}$ nicht einem Bahndrehimpuls (s.u.), sondern, wie im Stern-Gerlach Experiment identifiziert, dem Spin eines Elektrons.

Generell gilt, dass Bahndrehimpulse ganzzahlige j -Werte besitzen (s.u.). Halbzahlige Werte kommen durch Addition von Spin mit Spin und (oder) Bahndrehimpuls zustande.

6.5.5 Der Bahndrehimpulsoperator im Ortsraum

Wir behandeln nun den Bahndrehimpulsoperator \hat{L} (6.29) alleine, ohne Spin, und lösen sein Eigenwertproblem im Ortsraum. \hat{L} erfüllt dieselben Vertauschungsrelationen (6.31) wie der Gesamtdrehimpulsoperator \hat{J} . In den zuvor hergeleiteten Gleichungen für \hat{J} können wir daher auch überall J durch L ersetzen.

Eigenwertgleichung in Kugelkoordinaten

Der Rotationsoperator $e^{-i\hat{L}\alpha/\hbar}$ bewirkt eine Drehung von Achsen, aber keine radiale Änderung. Daher kann \hat{L} nur auf Winkelkoordinaten θ und φ wirken (wie wir auch noch explizit sehen werden) und es ist nützlich, Kugelkoordinaten $(r, \Omega) \equiv (r, \theta, \varphi)$ zu verwenden, mit

$$\begin{aligned}x &= r \cdot \sin \theta \cos \varphi \\y &= r \cdot \sin \theta \sin \varphi \\z &= r \cdot \cos \theta\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{L}^2 |l, m\rangle &= \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle \\ \hat{L}_z |l, m\rangle &= \hbar m |l, m\rangle\end{aligned}\tag{6.58}$$

Der Bahndrehimpuls \hat{L} ist ein Spezialfall des Gesamtdrehimpulses \hat{J} . Man kann deshalb \hat{L}^2 und \hat{L}_z gleichzeitig diagonalisieren, mit Eigenzuständen, die jetzt $|l, m\rangle$ statt $|j, m\rangle$ benannt werden. Die Eigenfunktionen im Ortsraum sind die Darstellung der Eigenvektoren $|l, m\rangle$ in Winkelkoordinaten θ, φ :

$$Y_l^m(\theta, \varphi) := \langle \theta, \varphi | l, m \rangle.$$

Sie heißen Kugelflächenfunktionen („spherical harmonics“). Sie bilden eine vollständige Basis im Raum aller winkelabhängigen Funktionen. Aus den Eigenwertgleichungen (6.52a) und (6.52b) wird⁵

⁵Wir verwenden jetzt ausnahmsweise auch für die Differentialoperatoren im Ortsraum Operatorzeichen.

EIGENWERTGLEICHUNGEN DER KUGELFLÄCHENFUNKTIONEN

$$Y_l^m(\theta, \varphi) \equiv \langle \theta, \varphi | l, m \rangle, \quad (6.59)$$

$$\hat{L}^2 Y_l^m(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (6.60)$$

$$\hat{L}_z Y_l^m(\theta, \varphi) = \hbar m Y_l^m(\theta, \varphi), \quad (6.61)$$

Von den Vertauschungsrelationen alleine wissen wir bereits, dass die Eigenwerte $m\hbar$ von \hat{L}_z ganzzahlige oder halbzahlige Vielfache von \hbar sind. Wir werden noch zeigen, dass beim Bahndrehimpuls nur ganzzahlige Werte von m und l möglich sind.

Ortsraumeigenfunktionen des Bahndrehimpulses

Die Berechnung der Eigenfunktionen $Y_l^m(\theta, \varphi)$ ist relativ langwierig. Wir besprechen deswegen nur die Struktur der Rechnung, sowie als explizite Beispiele $l = 0$ und $l = 1$.

Die Schritte sind die folgenden:

- Aus dem Bahndrehimpulsoperator wird im Ortsraum

$$\hat{L} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} \rightarrow -i\hbar \hat{\vec{r}} \times \nabla. \quad (6.62)$$

Diesen Differentialoperator kann man mit Hilfe von (6.58) in Kugelkoordinaten umschreiben.

- Der Operator \hat{L}_z produziert Rotationen um die z -Achse und wirkt deswegen nur auf den Winkel φ . Man findet die einfache Form

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (6.63)$$

Die Eigenwertgleichung von \hat{L}_z wird daher in Kugelkoordinaten zu

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} Y_l^m(\theta, \varphi) = im Y_l^m(\theta, \varphi)$$

mit der einfachen Lösung

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = e^{im\varphi} f(\theta), \quad (6.64)$$

mit einer beliebigen Funktion $f(\theta)$. Bei einer Drehung um 2π gehen die Koordinaten x, y, z eines Punktes \vec{x} in sich selber über, und daher tut dies auch der zugehörige Basisvektor $|\vec{x}\rangle$.⁸ Die Wellenfunktion $\psi(\vec{x}) \equiv \langle \vec{x} | \psi \rangle$ muss daher ebenfalls denselben Wert ergeben, woraus folgt, dass beim Bahndrehimpuls m ganzzahlig sein muss. Wegen $m \in \{-l, -l+1, \dots, l\}$ muss dann auch l ganzzahlig sein.

- Wir können jetzt ausnutzen, dass beim höchstmöglichen Wert $m = l$ gilt $\hat{L}_+ |l, m = l\rangle = 0$. Hieraus wird die Differentialgleichung (letztlich nur in θ)

$$\hat{L}_+ Y_l^l(\theta, \varphi) = 0,$$

wobei in Kugelkoordinaten

$$\hat{L}_\pm \equiv \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y = \hbar e^{\pm i\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (6.65)$$

gilt. Nach Normierung bekommen wir $Y_l^l(\theta, \varphi)$.

- Die restlichen Eigenfunktionen $Y_l^{l-1}, Y_l^{l-2}, \dots$ erhält man dann durch wiederholtes Anwenden von \hat{L}_- und nachfolgendes Normieren. Das Resultat ist:⁹

KUGELFLÄCHENFUNKTIONEN ($m \geq 0$)

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} \cdot e^{im\varphi} \cdot \underbrace{\frac{\sin^m \theta}{2^l l!} \cdot \frac{d^{l+m}}{d(\cos \theta)^{l+m}} (\sin \theta)^{2l}}_{P_l^m(\cos \theta)}$$

Die Funktionen mit $m < 0$ erhält man über $Y_l^{-m} = (-1)^m (Y_l^m)^*$

Bei Spiegelungen $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$ gilt $Y_l^m(-\vec{r}) = (-1)^l Y_l^m(\vec{r})$.

Die Funktionen $P_l^m(\cos \theta)$ heißen „zugeordnete Legendrepolynome“.

⁸Im Unterschied dazu erhält ein Spin- $\frac{1}{2}$ -Basisvektor wie $|+z\rangle$ bei einer Drehung um 2π ein Minuszeichen.

⁹Bezüglich des Faktors $(-1)^m$ gibt es auch andere Konventionen.

6.5. Drehungen

Die Orthonormalität $\langle l, m | l', m' \rangle = \delta_{l,l'} \delta_{m,m'}$ der Eigenvektoren wird zu

$$\int \int d\varphi d\cos\theta Y_l^{m*}(\theta, \varphi) Y_{l'}^{m'}(\theta, \varphi) = \delta_{l,l'} \delta_{m,m'}. \quad (6.66)$$

Das Integrationsmaß hat hier die bei Kugelkoordinaten erwartete Form $d\Omega \equiv d\cos\theta d\varphi \equiv \sin\theta d\theta d\varphi$.

Die Eigenzustände sind auch vollständig, entsprechend $\sum_{lm} |l, m\rangle \langle l, m| = \hat{1}$:

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_l^{m*}(\theta, \varphi) Y_l^m(\theta', \varphi') = \delta(\cos\theta - \cos\theta') \delta(\varphi - \varphi') \quad (6.67)$$

Daher kann man jede Funktion $f(\theta, \varphi)$ in Funktionen Y_l^m entwickeln:

$$f(\theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l c_l^m Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (6.68)$$

Die Koeffizienten erhält man wie immer durch skalare Multiplikation von links mit $\langle l', m' |$. Im Raum der Winkelfunktionen wird daraus

$$c_{l'}^{m'} = \int \int d\varphi d\cos\theta Y_{l'}^{m'}(\theta, \varphi)^* f(\theta, \varphi). \quad (6.69)$$

Beispiele: Rechnungen für $l = 0$ und $l = 1$

Der Einfachheit halber rechnen wir ohne Normierung.

s-Orbitale (s.u.)

Fall $l = 0$: Bei $l = 0$ gibt es nur $m = 0$, daher ist $\hat{L}_z Y_0^0 = 0$ und

$$\hat{L}_{\pm} Y_0^0 = 0 \Rightarrow \hat{L}_x Y_0^0 = \hat{L}_y Y_0^0 = 0.$$

Somit ergeben alle Generatoren \hat{L}_{α} von Rotationen bei Anwendung auf Y_0^0 Null. Deswegen muss $Y_0^0(\theta, \varphi)$ rotationsinvariant sein, d.h. eine Konstante.

p-Orbitale (s.u.)

Fall $l = 1$: Aus (6.64) wissen wir, dass

$m=1$: $Y_1^1 = e^{i\varphi} f(\theta)$

Die Gleichung

$$0 \stackrel{!}{=} \hat{L}_+ Y_1^{m=1} = e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i \cot\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) Y_1^{m=1} = e^{2i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial\theta} f(\theta) - 1 \cdot \frac{\cos\theta}{\sin\theta} f(\theta) \right)$$

Kapitel 6. Symmetrietransformationen

hat die Lösung $f(\theta) \propto \sin \theta$, und somit $Y_1^1 \propto e^{i\varphi} \sin \theta$.
Anwenden des Leiteroperators \hat{L}_- ergibt

$m=0$: $Y_1^0 \propto \hat{L}_- Y_1^1 = e^{-i\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) e^{i\varphi} \sin \theta \propto \cos \theta$

und ein zweites Mal

$m=-1$: $Y_1^{-1} \propto \hat{L}_- Y_1^0 = e^{-i\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \cos \theta \propto e^{-i\varphi} \sin \theta$.

Die niedrigsten Kugelflächenfunktionen, für $l = 0, 1, 2$, sind in Tab. 6.5.5 angegeben und in Abb. 6.4 graphisch dargestellt.

Real linear combinations:

$$Y_{lm} = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{l}} (-1)^m J_m Y_l^{-m} & m < 0 \\ \sqrt{\frac{2}{l}} (-1)^m \operatorname{Re} Y_l^m & m > 0 \end{cases}$$

<u>l</u>	<u>m</u>	<u>Kugelflächenfunktion</u>
0	0	$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$
1	0	$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$
	± 1	$Y_1^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$
2	0	$Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$
	± 1	$Y_2^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi}$
	± 2	$Y_2^{\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi}$

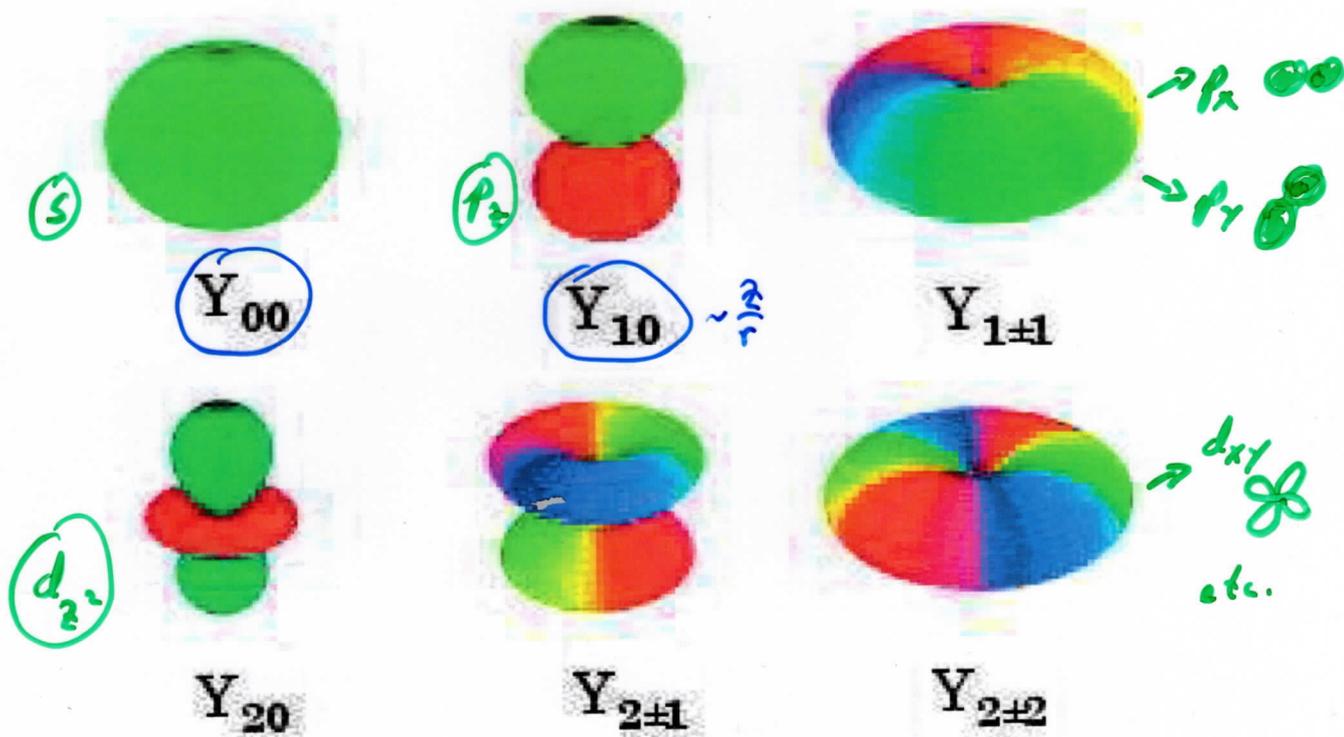
$l=2$: d-Orbitale

$Y_{10} = Y_1^0 \sim \cos \theta = \frac{z}{r}$
 $Y_{11} = \frac{1}{\sqrt{2}} (Y_1^{-1} - Y_1^1) \sim \sin \theta \cos \varphi = \frac{x}{r}$
 $Y_{1-1} = \frac{i}{\sqrt{2}} (Y_1^{-1} + Y_1^1) \sim \sin \theta \sin \varphi = \frac{y}{r}$
 $Y_{20} = Y_2^0 \sim \frac{2z^2 - x^2 - y^2}{r^2} = \frac{3z^2 - r^2}{r^2}$
 $Y_{21} \sim \frac{zx}{r^2}, Y_{20-1} \sim \frac{yz}{r^2}$
 $Y_{22} \sim \frac{x^2 - y^2}{r^2}, Y_{2-2} \sim \frac{xy}{r^2}$
 (45° Drehung)

Tabelle 6.2: Die ersten Kugelflächenfunktionen.

Still a basis

$x' \sim x - y$
 $y' \sim x + y$
 $\Rightarrow x' y' \sim x^2 - y^2$



Y_m^l

Abbildung 6.4: Darstellung der ersten Kugelflächenfunktionen Y_{lm} . Der Radius ist proportional zu $|Y_{lm}|$ dargestellt, und die Farbe repräsentiert die Phase $\arg(Y_{lm}^*)$, mit (z.B.) grün= 0 und rot= π .

Reellwertige Versionen der Kugelflächenfunktionen: siehe Seiten A100, A101