5. Drehimpuls

5.1 Gemeinsame Eigenzustände von kommutierenden Operatoren

Wir erwarten, daß sich im rotationssymmetrischen Potential Drehimpulseigenzustände finden lassen. Zur genaueren Begründung verschaffen wir uns zunächst einige allgemeine Aussagen über kommutierende hermitesche Operatoren, die wir dann auf H und den Drehimpuls $\vec{L}$ anwenden (sofern diese kommutieren).

Wir nehmen an: A, B sind hermitesch.

Satz 1 $[A,B]=0 \longrightarrow A$ und B haben gemeinsames System an Eigenzuständen.

Beweis:

(i) Sei $|\psi\rangle$ ein nicht entarteter Eigenzustand von A:

$$A|\psi\rangle = a|\psi\rangle$$

$$\longrightarrow AB|\psi\rangle = BA|\psi\rangle \Longleftrightarrow A(B|\psi\rangle) = a(B|\psi\rangle)$$

Da $|\psi\rangle$ der einzige Eigenzustand von A zum Eigenwert a ist, folgt $B|\psi\rangle$ ist proportional $|\psi\rangle$. Der Proportionalitätsfaktor b ist der Eigenwert zu B: $B|\psi\rangle = b|\psi\rangle$.

(ii) Der Eigenwert a sei m-fach entartet:

$A|\psi_j\rangle = a|\psi_j\rangle$ für $j=1,\dots,m$ wobei $\langle\psi_i|\psi_k\rangle = \delta_{ik}$ (siehe Kapitel 3.4).

Wiederum: $AB|\psi_j\rangle = BA|\psi_j\rangle \Longleftrightarrow A(B|\psi_j\rangle) = a(B|\psi_j\rangle)$

$\longrightarrow B|\psi_j\rangle$ ist Eigenzustand von A zum Eigenwert a, d.h. eine Linearkombination der $|\psi_k\rangle$ $(k=1,\dots,m)$:

$$B|\psi_j\rangle = \sum_k c_{jk}|\psi_k\rangle \quad \text{mit} \quad c_{jk} = \langle\psi_k|B|\psi_j\rangle = c_{kj}^*$$

Das letzte Gleichheitszeichen ist Konsequenz der Hermitizität von B. $\longrightarrow$ Die Matrix C ist selbst hermitesch.

$\longrightarrow$ $\exists$ unitäre Transformation U, so daß

$U^+ C U = C_D$, mit C_D diagonal.

$\Longrightarrow$ $CU = UC_D$ da $UU^+ = \mathbb{1}$.

$\longrightarrow$ Der k-te Spaltenvektor von U ist Eigenvektor von C zum Eigenwert C_{Dkk}:

$$\sum_j U^+_{rj} C_{jk} = \sum_j \left[C_{kj} U_{jr}\right]^* = \left[C_{Drr} U_{kr}\right]^* = C_{Drr} U^*_{kr}$$

$$\longrightarrow \sum_j U^*_{jr} B |\varphi_j\rangle = \sum_{k,j} U^*_{jr} C_{jk} |\varphi_k\rangle = \sum_k C_{Drr} U^*_{kr} |\varphi_k\rangle$$

$\longrightarrow$ $\sum_j U^*_{jr} |\varphi_j\rangle$ sind damit Eigenfunktionen von A (Eigenwert a) und von B (Eigenwert C_{Drr}).

<u>Satz 2</u> Ist $|n\rangle$ $(n = 1, 2, 3, \ldots)$ ein vollständiger Satz von Zuständen zu A und B mit Eigenwerten a_n bezw. b_n. Dann kommutieren A und B.

Beweis:

$$[A,B]|n\rangle = (AB - BA)|n\rangle = (a_n b_n - b_n a_n)|n\rangle = 0$$

$\longrightarrow$ für $|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$ beliebig ist $[A,B]|\psi\rangle = 0 \Longrightarrow [A,B] = 0$.

<u>Definition 1</u> Ein vollständiges System von Eigenfunktionen von A heißt <u>Basis</u> von A.

<u>Definition 2</u> Die Menge der hermiteschen Operatoren $A, B, \ldots, M$ heißt <u>vollständiger Satz</u> von Operatoren, wenn diese untereinander kommutieren und das gemeinsame System von Eigenzuständen nicht mehr entartet ist. Die

Eigenzustände $|a, b, \dots, m\rangle$ sind somit eindeutig durch die zugehörigen Eigenwerte $a, b, \dots, m$ charakterisiert.

<u>Satz 3</u> Ist $\mathcal{O} = o(A, B, \dots)$ eine Funktion der Operatoren $A, B, \dots$ eines vollständigen Satzes, dann ist die Basis dieses vollständigen Satzes auch die Basis von $\mathcal{O}$.

Beweis: $\mathcal{O}|a, b, \dots\rangle = o(A, B, \dots)|a, b, \dots\rangle = o(a, b, \dots)|a, b, \dots\rangle$

<u>Satz 4</u> Kommutiert ein Operator $\mathcal{O}$ mit einem vollständigen Satz von Operatoren, dann ist $\mathcal{O}$ Funktion dieser Operatoren.

Beweis: Wir schreiben wieder $\mathcal{O}|a, b, \dots\rangle = o(a, b, \dots)|a, b, \dots\rangle$

$\longrightarrow$ Dann können wir $\mathcal{O}$ ausdrücken als: $\mathcal{O} = o(A, B, \dots)$

Praktisch bedeutet dies, daß sofern $A, B, \dots$ untereinander kommutieren, die entsprechenden Observablen simultan meßbar sind. Mathematisch ist dies die Konsequenz der Tatsache, daß sich die Operatoren simultan diagonalisieren lassen.

5.2 Definition des Drehimpuls

Klassisch: $\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p} \xrightarrow[\text{prinzip}]{\text{Korrespondenz-}}$ quantenmechanisch: $\boxed{\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p} = \frac{\hbar}{i} \vec{x} \times \vec{\nabla}}$

$\vec{L}$ ist hermitesch: $\vec{L}^\dagger = (\vec{x} \times \vec{p})^\dagger = -\vec{p} \times \vec{x} \underset{[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}}{=} \vec{x} \times \vec{p}$

Es ist oft vorteilhaft, $\vec{L}$ in folgender Weise auszudrücken:

$L_i = \varepsilon_{ijk} x_j p_k$

Dabei benutzen wir die Einsteinsche Summenkonvention: über doppelte Indizes wird summiert.

Das Levi-Civita-Symbol ist der vollständig antisymmetrische Tensor in drei Dimensionen:

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} 1 & \text{für } (ijk) \text{ gerade Permutationen von } (1\,2\,3) \\ -1 & \text{für } (ijk) \text{ ungerade Permutationen von } (1\,2\,3) \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$\longrightarrow$ Kreuzprodukt: $(\vec{a} \times \vec{b})_i = \varepsilon_{ijk}\, a_j b_k$

Nützlich sind oft die Summen:

$$\varepsilon_{ijk}\,\varepsilon_{imn} = \delta_{jm}\delta_{kn} - \delta_{jn}\delta_{km}$$

$$\varepsilon_{ijk}\,\varepsilon_{ijn} = 2\,\delta_{kn}$$

$$\varepsilon_{ijk}\,\varepsilon_{ijk} = 6$$

(Wir können diese sukzessive durch Ersetzung der Indizes und Anwendung der Summenkonvention erhalten).

Es gelten die grundlegenden Vertauschungsrelationen:

$$\boxed{[L_i, L_j] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk}\,L_k, \quad [L_i, x_j] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk}\,x_k, \quad [L_i, p_j] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk}\,p_k}$$

Nachrechnen:

$$[L^i, x^j] = [\varepsilon^{ikl} x^k p^l, x^j] = \frac{\hbar}{i}\,\varepsilon^{ikj} x^k = i\hbar\,\varepsilon^{ijk} x^k$$

$$[L^i, p^j] = [\varepsilon^{ikl} x^k p^l, p^j] = i\hbar\,\varepsilon^{ijl} p^l = i\hbar\,\varepsilon^{ijk} p^k$$

$$\begin{aligned}
[L^i, L^j] &= \varepsilon^{ikl} x^k p^l\, \varepsilon^{jmn} x^m p^n - \varepsilon^{jmn} x^m p^n\, \varepsilon^{ikl} x^k p^l \\
&= i\hbar\,\varepsilon^{jmk}\,\varepsilon^{ikl}\, x^m p^l - i\hbar\,\varepsilon^{jln}\,\varepsilon^{ikl}\, x^k p^n \\
&= i\hbar\,(\delta^{jl}\delta^{mi} - \cancel{\delta^{ji}\delta^{ml}})\, x^m p^l \\
&\quad - i\hbar\,(\delta^{ni}\delta^{jk} - \cancel{\delta^{nk}\delta^{ji}})\, x^k p^n \\
&= i\hbar\,(\delta^{im}\delta^{jn} - \delta^{in}\delta^{jm})\, x^m p^n = i\hbar\,\varepsilon^{ijk} L^k
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
x^m p^n x^k p^l &= x^m x^k p^n p^l - i\hbar\,\delta^{nk} x^m p^l \\
&= x^k p^l x^m p^n - i\hbar\,\delta^{nk} x^m p^l + i\hbar\,\delta^{ml} x^k p^n
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\varepsilon^{ijk} L^k &= \varepsilon^{ijk}\,\varepsilon^{kmn}\, x^m p^n = \varepsilon^{ijk}\,\varepsilon^{mnk}\, x^m p^n \\
&= (\delta^{im}\delta^{jn} - \delta^{in}\delta^{jm})\, x^m p^n
\end{aligned}$$

Die hier offensichtliche allgemeine Struktur werden wir noch

begründen.

Wir erinnern an:

$$[C, A^2] = -A[A,C] - [A,C]A$$
$$= A[C,A] + [C,A]A$$

$$[AB, C] = A[B,C] + [A,C]B \Longrightarrow [A^2, C] = A[A,C] + [A,C]A$$

Somit folgt für obige Kommutatoren:

$$[L^i, \vec{V}^2] = [L^i, V^j V^j] = V^j [L^i, V^j] + [L^i, V^j] V^j$$
$$= 2i\hbar \varepsilon^{ijk} V^k V^j = 0$$

Insbesondere: $[\vec{L}, \vec{L}^2] = 0$

Falls $H = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(|\vec{x}|)$ kommutiert also $\vec{L}$ mit H. Allerdings kommutieren die $L_{1,2,3}$ nicht untereinander. Wir werden sehen, daß für dreidimensionale, sphärisch symmetrische Probleme $\{H, L_z \equiv L_3, \vec{L}^2\}$ ein vollständiger Satz von Operatoren ist. Die Wahl der z-Komponente ist dabei Konvention, und wir sprechen von den Eigenwerten von L_z und $\vec{L}^2$ bei gegebenem Energieeigenwert als „gute Quantenzahlen" (d.h. solche, deren Erwartungswert eine verschwindende Fluktuation haben kann).

5.3 Algebraische Relationen und Spektrum

Wir können aus den Kommutatorrelationen bereits das Spektrum der Operatoren L_z und $\vec{L}^2$ bestimmen ($L_{1,2,3} \equiv L_{x,y,z}$).

Definiere Leiteroperatoren: $L_\pm = L_x \pm i L_y \Longrightarrow (L_\pm)^\dagger = L_\mp$

$\longrightarrow$ Kommutatorrelationen:

$$[L_z, L_+] = \hbar L_+, \quad [L_z, L_-] = -\hbar L_-, \quad [L_+, L_-] = 2\hbar L_z,$$
$$[\vec{L}^2, L_\pm] = 0$$

Nachrechnen:

$$[L_z, L_\pm] = [L_z, L_x \pm i L_y] = i\hbar L_y \pm \hbar L_x = \pm \hbar L_\pm$$

$$[L_+, L_-] = [L_x + iL_y, L_x - iL_y] = -i[L_x, L_y] + i[L_y, L_x] = 2\hbar L_z$$

Weiterhin nützlich:

$$\vec{L}^2 = \frac{1}{2}(L_+L_- + L_-L_+) + L_z^2$$

$$L_\pm L_\mp = L_x^2 + L_y^2 \mp i[L_x, L_y] = L_x^2 + L_y^2 \pm \hbar L_z$$
$$= \vec{L}^2 - L_z(L_z \mp \hbar)$$

$\vec{L}^2$ ist positiv definit, da $\langle\psi|\vec{L}^2|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{3} \langle L_i\psi|L_i\psi\rangle$.

Bezeichnung der Eigenwerte und -Vektoren:

$$\vec{L}^2|l\ m\rangle = \hbar^2 l(l+1)|l\ m\rangle$$

$$L_z|l\ m\rangle = \hbar m\,|l\ m\rangle$$

Betrachte nun $L_\pm|l\,m\rangle$ und bestimme Eigenwerte:

$$L_z L_\pm|l\ m\rangle = L_\pm L_z|l\,m\rangle \pm \hbar L_\pm|l\ m\rangle$$
$$= \hbar(m\pm 1)\,L_\pm|l\ m\rangle$$

$$\vec{L}^2 L_\pm|l\,m\rangle = L_\pm\vec{L}^2|l\,m\rangle = \hbar^2 l(l+1)L_\pm|l\,m\rangle$$

$L_\pm$ erhöht/erniedrigt also den Eigenwert von L_z.

Zur Bestimmung der Eigenfunktion benötigen wir noch die Normierung:

$$L_\pm L_\mp|l\,m\rangle = \left(\hbar^2 l(l+1) - \hbar^2 m(m\mp 1)\right)|l\,m\rangle$$
$$= \hbar^2(l\pm m)(l\mp m+1)|l\ m\rangle$$

$\longrightarrow$

$$\langle l m|L_\pm L_\mp|l\,m\rangle = \hbar^2(l\pm m)(l\mp m+1)$$

$\longrightarrow$

$$\boxed{|l\ m\pm 1\rangle = \frac{L_\pm|l\,m\rangle}{\hbar\sqrt{(l\mp m)(l\pm m+1)}}}$$

Für positive Norm muß gelten:

$$l(l+1) - m(m\mp 1) \geq 0 \iff l(l+1) \geq m(m\mp 1)$$

$$\xrightarrow{m\geq 0} l \geq m \quad \xrightarrow{m<0} l \geq -m \quad \xrightarrow{\text{insgesamt}} \boxed{l \geq |m|}$$

Um zu vermeiden, daß

$$L_\pm |l\, m\rangle = \hbar\sqrt{(l\mp m)(l\pm m+1)}\,|l\; m\pm 1\rangle$$

$|m\pm 1| > l$ erzeugt, muß die Reihe abbrechen.

$\longrightarrow$ $m_{min} \leq m \leq m_{max}$ mit $m_{min} = -l$ und $m_{max} = l$

Muß durch Anwendung von L_+ von m_{min} zu m_{max} kommen $\longrightarrow$ $m_{max} - m_{min} = 2l = 0, 1, 2, 3, \ldots$

$$\boxed{\begin{array}{l} \longrightarrow\; l = 0, 1, 2, 3, \ldots \quad \text{oder} \quad l = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \ldots \\ \text{und in beiden Fällen:}\; m = -l, -l+1, \ldots, l-1, l\,. \end{array}}$$

Für den Bahndrehimpuls, den wir im Folgenden besprechen, ist nur der ganzzahlige Fall realisiert. Allerdings kann der intrinsische Drehimpuls (Spin) von Teilchen nichtganzzahlig sein. In diesen Vorlesungen werden wir noch den Fall Spin-$\frac{1}{2}$, welcher im Elektron realisiert ist, behandeln.

Die <u>$2l+1$ Zustände zum Eigenwert $\hbar^2 l(l+1)$ von $\vec{L}^2$</u>, welche auch Eigenzustände von L_z sind, bilden einen invarianten Unterraum bezgl. $\vec{L}$, d.h. sie gehen unter Anwendung einer Operatorfunktion $f(L_i)$ ineinander über.

Wir wollen noch folgende nützliche Relation beweisen:

$$|l\; m\rangle = \sqrt{\frac{(l\pm m)!}{(2l)!\,(l\mp m)!}}\left(\frac{L_\mp}{\hbar}\right)^{l\mp m} |l\; \pm l\rangle$$

Beweis: durch vollständige Induktion mit $m = \pm(l-x)$, $x = 0, 1, \ldots, 2l$.

Behauptung $\Longleftrightarrow$ $\hbar^x \sqrt{\frac{(2l)!\,x!}{(2l-x)!}}\,|l\; \pm l \mp x\rangle = L_\mp^x\,|l\; \pm l\rangle$

Induktionsanfang $(x=1)$: $\hbar\sqrt{2l}\,|l\; \pm l \mp 1\rangle = L_\mp^x\,|l\; \pm l\rangle$

ist erfüllt (vgl. obige Rekursionsformel).

Induktionsschritt: $L_\mp |l\, m\rangle = \hbar\sqrt{(l\pm m)(l\mp m+1)}\,|l\; m\mp 1\rangle$

$$\hbar^x \sqrt{\frac{(2l)!\,x!}{(2l-x)!}}\, L_\mp |l\;\pm l\mp x\rangle = \hbar^{x+1}\sqrt{\frac{(2l)!\,x!}{(2l-x)!}}\sqrt{(2l-x)(x+1)}\,|l\;\pm l\mp(x+1)\rangle$$

$$= \hbar^{x+1}\sqrt{\frac{(2l)!\,(x+1)!}{(2l-(x+1))!}}\,|l\;\pm l\mp(x+1)\rangle = L_\mp^{x+1}|l\;\pm l\rangle$$

Was zu beweisen war.

5.4 Bahndrehimpuls und Kugelflächenfunktionen

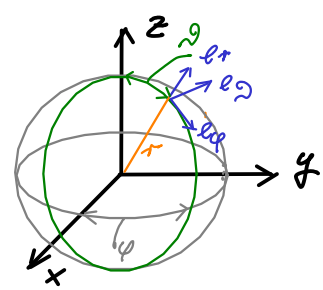
Die Diskussion im vorhergehenden Abschnitt ist gültig für allgemeine Operatoren welche die grundlegenden Vertauschungsrelationen des Drehimpuls erfüllen. Während wir noch sehen werden, daß diese sich damit auch auf den Spin (intrinsischer Drehimpuls von Punktteilchen) anwenden lassen, werden wir zunächst die expliziten Eigenfunktionen des Bahndrehimpulsoperators $\vec{L} = \vec{x}\times\vec{p}$ konstruieren.

Wähle dazu die z-Achse als Polachse und verwende die üblichen Kugelkoordinaten:

$x = r\sin\vartheta\cos\varphi$

$y = r\sin\vartheta\sin\varphi$

$z = r\cos\vartheta$



Zu lösen sind die Eigenwertgleichungen:

$$\frac{1}{\hbar^2}\vec{L}^2 Y_{lm}(\vartheta,\varphi) = l(l+1)\,Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$$

$$\frac{1}{\hbar}L_z Y_{lm}(\vartheta,\varphi) = m\,Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$$

$\longrightarrow$ zunächst Transformation in Kugelkoordinaten:

Um die partiellen Ableitungen in Kugelkoordinaten zu erhalten, notieren wir die Jacobi-Matrix

$$J = \frac{\partial(x,y,z)}{\partial(r,\vartheta,\varphi)} = \begin{pmatrix} \sin\vartheta\cos\varphi & r\cos\vartheta\cos\varphi & -r\sin\vartheta\sin\varphi \\ \sin\vartheta\sin\varphi & r\cos\vartheta\sin\varphi & r\sin\vartheta\cos\varphi \\ \cos\vartheta & -r\sin\vartheta & 0 \end{pmatrix}$$

$$\longrightarrow \left(\frac{\partial}{\partial r}, \frac{\partial}{\partial\vartheta}, \frac{\partial}{\partial\varphi}\right) = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right) J$$

Zur Berechnung des $\vec{\nabla}$-Operators benötigen wir also die inverse Matrix:

$$\left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right) = \left(\frac{\partial}{\partial r}, \frac{\partial}{\partial\vartheta}, \frac{\partial}{\partial\varphi}\right) J^{-1}$$

$$J^{-1} = \begin{pmatrix} \sin\vartheta\cos\varphi & \sin\vartheta\sin\varphi & \cos\vartheta \\ \frac{1}{r}\cos\vartheta\cos\varphi & \frac{1}{r}\cos\vartheta\sin\varphi & -\frac{1}{r}\sin\vartheta \\ -\frac{1}{r}\frac{\sin\varphi}{\sin\vartheta} & \frac{1}{r}\frac{\cos\varphi}{\sin\vartheta} & 0 \end{pmatrix}$$

$$\left.\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &= \sin\vartheta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\cos\vartheta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta} - \frac{1}{r}\frac{\sin\varphi}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\varphi} \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \sin\vartheta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\cos\vartheta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \frac{1}{r}\frac{\cos\varphi}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\varphi} \\ \frac{\partial}{\partial z} &= \cos\vartheta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r}\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta} \end{aligned}\right\} \text{Spalten von } J^{-1}$$

Drehung der Basisvektoren:

$$\vec{e}_r = \frac{\frac{\partial\vec{r}}{\partial r}}{\left|\frac{\partial\vec{r}}{\partial r}\right|}, \qquad \vec{e}_\vartheta = \frac{\frac{\partial\vec{r}}{\partial\vartheta}}{\left|\frac{\partial\vec{r}}{\partial\vartheta}\right|}, \qquad \vec{e}_\varphi = \frac{\frac{\partial\vec{r}}{\partial\varphi}}{\left|\frac{\partial\vec{r}}{\partial\varphi}\right|}$$

$\longrightarrow$ 1. Spalte von J $\qquad$ $\longrightarrow$ 2. Spalte von J $\qquad$ $\longrightarrow$ 3. Spalte von J

$$\vec{e}_r = \begin{pmatrix} \sin\vartheta\cos\varphi \\ \sin\vartheta\sin\varphi \\ \cos\vartheta \end{pmatrix}, \quad \vec{e}_\vartheta = \begin{pmatrix} \cos\vartheta\cos\varphi \\ \cos\vartheta\sin\varphi \\ -\sin\vartheta \end{pmatrix}, \quad \vec{e}_\varphi = \begin{pmatrix} -\sin\varphi \\ \cos\varphi \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\vec{\nabla} = (\vec{\nabla}\cdot\vec{e}_r)\,\vec{e}_r + (\vec{\nabla}\cdot\vec{e}_\vartheta)\,\vec{e}_\vartheta + (\vec{\nabla}\cdot\vec{e}_\varphi)\,\vec{e}_\varphi$$

$$= \vec{e}_r\cdot\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\vec{e}_\vartheta}{r}\frac{\partial}{\partial\vartheta} + \frac{\vec{e}_\varphi}{r\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

Direktes Nachrechnen ergibt damit:

$$\left.\begin{aligned} L_x &= \frac{\hbar}{i}\left(-\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta} - \cos\varphi\cot\vartheta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\ L_y &= \frac{\hbar}{i}\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\vartheta} - \sin\varphi\cot\vartheta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\end{aligned}\right\} L_\pm = \hbar\, e^{\pm i\varphi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\vartheta} + i\cot\vartheta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

$$L_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

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

Die zweite Eigenwertgleichung hängt nicht von ϑ ab, und somit folgt:

$$-i\frac{\partial}{\partial\varphi}Y_{lm}(\vartheta,\varphi) = m\,Y_{lm}(\vartheta,\varphi) \Longrightarrow Y_{lm}(\vartheta,\varphi) = f_{lm}(\vartheta)\,e^{im\varphi}$$

Anstatt die erste Eigenwertgleichung (2. Ordnung) zu lösen betrachten wir den Fall $m = \pm l$ und lösen:

$$L_\pm Y_{l\pm l}(\vartheta,\varphi) = 0$$

$$\longrightarrow \left(\frac{\partial}{\partial\vartheta} - l\cot\vartheta\right)f_{l\pm l}(\vartheta) = 0 \Longrightarrow f_{l\pm l}(\vartheta) = C\sin^l\vartheta \quad \text{mit } C = \text{const.}$$

Diese Gleichung ist 1. Ordnung und aus ihrer Lösung können wir die übrigen Eigenfunktionen mit Hilfe des Leiteroperatoren $L_\pm$ bestimmen.

Normierung: $\quad \frac{d\cos\vartheta}{d\vartheta} = -\sin\vartheta$

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\vartheta\, d\vartheta\, |Y_{l\pm l}(\vartheta,\varphi)|^2 = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-1}^{1} d\cos\vartheta\; C^2\sin^{2l}\vartheta$$

$$= 2\pi C^2 \int_{-1}^{1} d\cos\vartheta \, (1-\cos^2\vartheta)^\ell = \pi C^2 \, 4^{\ell+1} \frac{(\ell!)^2}{(2\ell+1)!} \overset{!}{=} 1$$

$$\longrightarrow \quad Y_{\ell\pm\ell}(\vartheta,\varphi) = \frac{1}{\ell!} \sqrt{\frac{(2\ell+1)!}{\pi 4^{\ell+1}}} \, \sin^\ell\vartheta \, e^{\pm i\ell\varphi}$$

Berechnung des $d\cos\vartheta$ - Integrals:

$$x_\ell = \int_{-1}^{1} dz \, (1-z^2)^\ell = \int_{-1}^{1} dz \, (1-z^2)^{\ell-1} - \int_{-1}^{1} dz \, z^2 (1-z^2)^{\ell-1}$$

$$= x_{\ell-1} + \frac{1}{2\ell} \int_{-1}^{1} dz \, z \frac{d}{dz} (1-z^2)^\ell$$

$$\underset{\text{P.I.}}{=} x_{\ell-1} + \frac{1}{2\ell} \Big[z(1-z^2)^\ell \Big]_{-1}^{1} - \frac{1}{2\ell} \int_{-1}^{1} dz \, (1-z^2)^\ell$$

$\longrightarrow$

$$x_\ell \left(1 + \frac{1}{2\ell}\right) = x_{\ell-1} \iff x_\ell = \frac{2\ell}{2\ell+1} x_{\ell-1}$$

mit $x_0 = 2$:

$$x_\ell = \frac{2\ell}{2\ell+1} \frac{2(\ell-1)}{2\ell-1} \frac{2(\ell-2)}{2\ell-3} * \dots * \frac{2\cdot 2}{5} \frac{2\cdot 1}{3} * 2$$

$$= \frac{2^2 \ell^2}{(2\ell+1)2\ell} \frac{2^2(\ell-1)^2}{(2\ell-1)(2\ell-2)} * \dots * \frac{2^2 2^2}{5\cdot 4} \frac{2^2\cdot 1^2}{3\cdot 2} * 2 = \frac{2\, 4^\ell (\ell!)^2}{(2\ell+1)!}$$

Zur Erzeugung der $Y_{\ell m}$ zeigen wir zunächst folgendes:

$$\left(\frac{L_\mp}{\hbar}\right)^s e^{i\mu\varphi} f(\vartheta) = (\mp 1)^s \, e^{i(\mu\pm s)\varphi} \left(\sin^{s\pm\mu}\vartheta \frac{d^s}{d(\cos\vartheta)^s} \sin^{\mp\mu}\vartheta \right) f(\vartheta)$$

Beweis durch Induktion:

Induktionsanfang $(s=1)$:

$$\frac{1}{\hbar} L_\pm e^{i\mu\varphi} f(\vartheta) = e^{i(\mu\pm 1)\varphi} \left(\pm \frac{d}{d\vartheta} - \mu \cot\vartheta \right) f(\vartheta)$$

$$= e^{i(\mu\pm 1)\varphi}\left(\mp \sin\vartheta \frac{d}{d\cos\vartheta} - \mu \frac{\cos\vartheta}{\sin\vartheta}\right) f(\vartheta)$$

$$= \mp e^{i(\mu\pm 1)\varphi}\left(\sin^{1\pm\mu}\vartheta \frac{d}{d\cos\vartheta} \sin^{\mp\mu}\vartheta\right) f(\vartheta)$$

wobei wir benutzt haben

$$\frac{d}{d\vartheta} = -\sin\vartheta \frac{d}{d\cos\vartheta} \qquad \frac{d\sin\vartheta}{d\cos\vartheta} = -\frac{\cos\vartheta}{\sin\vartheta}$$

Induktionsschritt $(s-1 \longrightarrow s)$:

$$\frac{1}{\hbar} L_\pm (\mp 1)^{s-1} e^{i(\mu\pm(s-1))\varphi}\left(\sin^{s-1\pm\mu}\vartheta \frac{d^{s-1}}{d(\cos\vartheta)^{s-1}} \sin^{\mp\mu}\vartheta\right) f(\vartheta)$$

$$= e^{i(\mu\pm s)\varphi}(\mp 1)^{s-1}\left(\mp\sin\vartheta \frac{d}{d\cos\vartheta} - (\mu\pm(s-1))\frac{\cos\vartheta}{\sin\vartheta}\right)$$

$$* \left(\sin^{s-1\pm\mu}\vartheta \frac{d^{s-1}}{d(\cos\vartheta)^{s-1}} \sin^{\mp\mu}\vartheta\right) f(\vartheta)$$

$$= e^{i(\mu\pm s)\varphi}(\mp 1)^{s}\left(\sin^{1\pm\mu+s-1}\vartheta \frac{d}{d\cos\vartheta} \cancel{\sin^{\mp\mu-s+1}\vartheta}\right)$$

$$* \left(\cancel{\sin^{s-1\pm\mu}\vartheta} \frac{d^{s-1}}{d(\cos\vartheta)^{s-1}} \sin^{\mp\mu}\vartheta\right) f(\vartheta)$$

$$= (\mp 1)^{s} e^{i(\mu\pm s)\varphi}\left(\sin^{s\pm\mu}\vartheta \frac{d^{s}}{d(\cos\vartheta)^{s}} \sin^{\mp\mu}\vartheta\right) f(\vartheta)$$

Was zu beweisen war.

Erzeuge Y_{lm} aus Y_{l-l} mit dieser Formel mit

L_+^s, $\mu = -l$, $\mu + s = m \Longleftrightarrow s = l+m$, $s+\mu = m$, $-\mu + l = 2l$

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

$$* \sqrt{\frac{(l-m)!}{(2l)!(l+m)!}} \rightsquigarrow \text{Normierung für } |l\ -l\rangle \longrightarrow |l\ m\rangle$$

In diesem Ausdruck identifizieren wir das <u>zugeordnete Legendrepolynom:</u>

$$P_{\ell m}(x) = \frac{(-1)^m}{2^\ell \ell!} (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^{\ell+m}}{dx^{\ell+m}} (x^2-1)^\ell$$

$\longrightarrow$

$$Y_{\ell m}(\vartheta,\varphi) = \sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell-m)!}{4\pi(\ell+m)!}}\, e^{im\varphi} P_{\ell m}(\cos\vartheta)$$ (<u>Kugelflächenfunktionen</u>)

Anmerkung: Die zugeordneten Legendre-Polynome stehen zu den <u>Legendre-Polynomen</u>

$$P_\ell(x) = \frac{1}{2^\ell \ell!} \frac{d^\ell}{dx^\ell} (x^2-1)^\ell$$

in der Beziehung

$$P_{\ell m}(x) = (-1)^m (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m} P_\ell(x)$$

Als normierte Eigenfunktionen des kompletten Satzes (auf der Sphäre) der Operatoren $L_z, \vec{L}^2$ erfüllen die $Y_{\ell m}$:

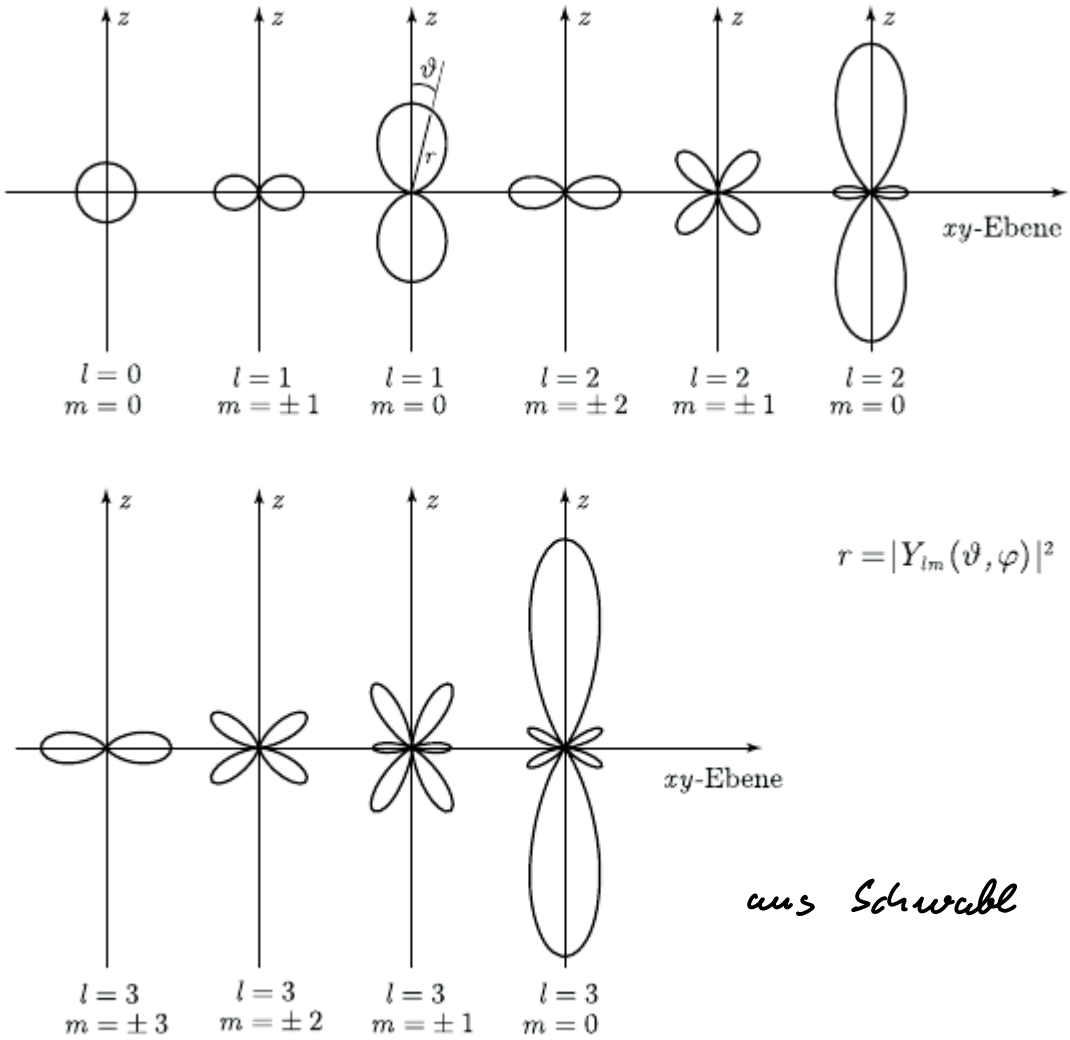
Orthogonalität:

$$\int_0^\pi \sin\vartheta \, d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi \; Y^*_{\ell' m'}(\vartheta,\varphi) Y_{\ell m}(\vartheta,\varphi) = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}$$

Vollständigkeit:

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_{\ell m}(\vartheta,\varphi) Y^*_{\ell m}(\vartheta',\varphi') = \frac{1}{\sin\vartheta} \delta(\vartheta-\vartheta') \delta(\varphi-\varphi')$$

Zur zweidimensionalen Darstellung der Kugelflächenfunktionen können wir Polardiagramme verwenden:



aus Schwabl

Abb. 5.6. Polardiagramme der Bahndrehimpulseigenfunktionen Y_{lm} mit $l = 0, 1, 2, 3$

Alternativ lassen sich diese Funktionen auch durch dreidimensionale (farbkodierte) Diagramme der Realteile auf der Kugeloberfläche veranschaulichen

Drehimpulseigenzustände werden auch Orbitale genannt, dabei entsprechen $l = 0, 1, 2, 3, 4, \ldots$ den sogenannten s, p, d, f, g ... -Orbitalen.

5.5 Drehimpuls und Drehungen

Rotationen sind zunächst durch ihre Wirkung auf einen Vektor definiert: $\vec{x} \xmapsto{R} \vec{x}\,'$

Die Rotation ist eine lineare Transformation, läßt sich also durch eine Matrix darstellen: $\vec{x} \mapsto R\vec{x}$

Darüberhinaus erhält sie die Länge der Vektoren:

$$\vec{x}\cdot\vec{x} \overset{!}{=} (R\vec{x})\cdot(R\vec{x}) = (\vec{x})^t R^t R \vec{x} \Longrightarrow R^t R = \mathbb{1}$$

R ist also eine orthogonale Matrix (und damit ein Spezialfall der bereits besprochenen unitären Transformationen).

Wir können um die drei Raumachsen drehen mit:

$$R_x(\alpha) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\alpha & -\sin\alpha \\ 0 & \sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix} \quad R_y(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos\alpha & 0 & \sin\alpha \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\alpha & 0 & \cos\alpha \end{pmatrix} \quad R_z(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Allgemeine Drehungen durch hintereinanderausführen $\longrightarrow$

$3 * 2 * 2 = 12$ mögliche Reihenfolgen (nicht zwei gleiche hintereinander)

Standardkonvention: $R(\alpha,\beta,\gamma) = R_z(\gamma) R_x(\beta) R_z(\alpha)$ (Eulersche Winkel)

Andere Parametrisierung: Drehung um Achse $\vec{n}$ ($|\vec{n}| = 1$) um Winkel φ.

Definiere: $\vec{\varphi} = \varphi\vec{n}$,

$$\Lambda_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \Lambda_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \Lambda_3 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{\Lambda} = \begin{pmatrix} \Lambda_1 \\ \Lambda_2 \\ \Lambda_3 \end{pmatrix}$$

Dabei ist: $(\Lambda_i)_{jk} = -\varepsilon_{ijk}$

vgl. Entwicklung der Drehmatrizen für kleine α

Infinitesimal $\delta\vec{\varphi} = \delta\varphi\,\vec{n}$:

$$R(\delta\vec{\varphi})\vec{x} = \vec{x} + \delta\vec{\varphi}\times\vec{x} = \vec{x} + \delta\vec{\varphi}\cdot\vec{\Lambda}\,\vec{x} = \overbrace{(\mathbb{1} + \delta\vec{\varphi}\cdot\vec{\Lambda})}\,\vec{x}$$

$$(R(\delta\vec{\varphi})\vec{x})_i = x_i + \varepsilon_{ijk}\,\delta\varphi_j\, x_k = x_i + \delta\varphi_j (\Lambda_j)_{ik} x_k$$

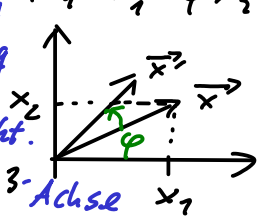
Für $\vec{\varphi} \parallel \vec{\psi}$ gilt: $R(\vec{\varphi}+\vec{\psi}) = R(\vec{\varphi})R(\vec{\psi})$

Sei nun $\delta\vec{\varphi} = \dfrac{\vec{\varphi}}{m}$ mit $m \longrightarrow \infty$:

Darstellung der Drehung mit Kreuzprodukt. Beispiel: um 3-Achse

$Rx_2 = x_2 + \varphi x_1$

$Rx_1 = x_1 - \varphi x_2$



$$\longrightarrow R(\vec{\varphi}) = R^m\left(\frac{\vec{\varphi}}{m}\right) = \lim_{m\to\infty}\left(\mathbb{1} + \frac{1}{m}\,\vec{\varphi}\cdot\vec{\Lambda}\right)^m = e^{\vec{\varphi}\cdot\vec{\Lambda}}$$

Insgesamt: $\vec{x} \longmapsto e^{\vec{\varphi}\cdot\vec{\Lambda}}\,\vec{x}$

Bemerkung: $[i\hbar\Lambda_i, i\hbar\Lambda_j] = \varepsilon_{ijk}(i\hbar)^2\Lambda_k$

$\longrightarrow i\hbar\vec{\Lambda}$ erfüllt die Drehimpulsalgebra

Wir nennen die hermiteschen Operatoren $i\Lambda_j$ <u>Erzeugende</u> von Drehungen.

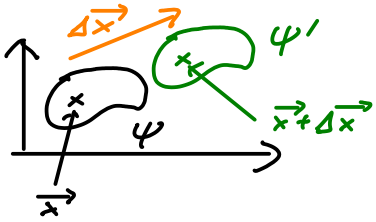
<u>Bemerkung:</u>

$R(\vec{\varphi}) = e^{\vec{\varphi}\cdot\vec{\Lambda}}$ ist die Gruppe $SO(3)$ der orthogonalen 3×3 Matrizen mit Determinante 1. Die Gruppeneigenschaften („Drehgruppe") lassen sich leicht verifizieren.

Wir wollen nun zeigen, daß wir allgemein durch das Exponentieren des Drehimpulsoperators ($i\hbar\vec{\Lambda} \longrightarrow \vec{L}$) Drehungen der Ortswellenfunktion erzeugen. Dazu betrachten wir zunächst in Analogie die Erzeugung von Verschiebungen durch den Impulsoperator.

<u>Aktive Translationen</u>

Aktive Verschiebung des physikalischen Systems um $\Delta\vec{x}$.



$$\psi'(\vec{x}) = \psi(\vec{x}-\Delta\vec{x}) \iff$$
$$\psi'(\vec{x}+\Delta\vec{x}) = \psi(\vec{x})$$

Wir zeigen, daß so eine Translation durch den Impulsoperator erzeugt wird:

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta\vec{x}\cdot\vec{P}}\psi(\vec{x}) = \psi(\vec{x}-\Delta\vec{x}) = \psi'(\vec{x})$$

Mit $\delta\vec{x} = \frac{\Delta\vec{x}}{n} \Longrightarrow e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta\vec{x}\cdot\vec{p}} = e^{-\Delta\vec{x}\cdot\vec{\nabla}} = \lim_{n\to\infty}(1-\delta\vec{x}\cdot\vec{\nabla})^n$

Außerdem: $(1-\delta\vec{x}\cdot\vec{\nabla})\psi(\vec{x}) = \psi(\vec{x}-\delta\vec{x}) + \mathcal{O}(\frac{1}{n^2})$

$\rightarrow$

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta\vec{x}\cdot\vec{p}}\psi(\vec{x}) = \lim_{n\to\infty}(1-\delta\vec{x}\cdot\vec{\nabla})^n\psi(\vec{x}) = \psi(\vec{x}-\Delta\vec{x})$$

Wirkung auf Ortseigenfunktion:

$$|\vec{a}\rangle \longleftrightarrow \delta^3(\vec{x}-\vec{a}) \longrightarrow |\vec{a}'\rangle = |\vec{a}+\Delta\vec{x}\rangle \longleftrightarrow \delta^3(\vec{x}-(\vec{a}+\Delta\vec{x}))$$

Klassisch: Translationsinvarianz der Lagrange- bzw. Hamiltonfunktion $\longrightarrow$ Impulserhaltung

Quantenmechanisch: Translationsinvarianz eines Operators $A \rightarrow$

$$\langle\psi|A|\varphi\rangle \overset{!}{=} \langle\psi'|A|\varphi'\rangle = \langle\psi|e^{\frac{i}{\hbar}\Delta\vec{x}\cdot\vec{p}}A\,e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta\vec{x}\cdot\vec{p}}|\varphi\rangle$$

$$= \langle\psi|A|\varphi\rangle + \frac{i}{\hbar}\Delta\vec{x}\cdot\langle\psi|[\vec{p},A]|\varphi\rangle + \mathcal{O}(\Delta\vec{x}^2)$$

$\Longrightarrow [\vec{p},A]=0 \rightarrow \vec{p}$ und A sind simultan diagonalisierbar.

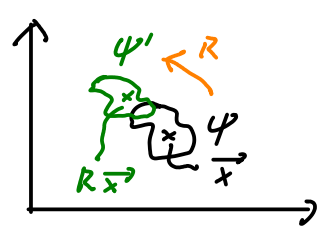
Für $[\vec{p},H]=0$ folgt mit Ehrenfest:

$$\frac{d}{dt}\langle\vec{p}\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle[H,\vec{p}]\rangle = 0 \quad .$$

Aktive Drehungen

Drehung des physikalischen Systems um R (aktive Transformation):

$\psi \longmapsto \psi'$ mit $\psi'(R\vec{x}) = \psi(\vec{x}) \Leftrightarrow \psi'(\vec{x}) = \psi(R^{-1}\vec{x})$



Gesucht: unitärer Operator $D(R)$, so daß

$$\langle\psi'|\psi'\rangle = \langle D(R)\psi|D(R)\psi\rangle = \langle\psi|D^+(R)D(R)|\psi\rangle$$
$$= \langle\psi|\psi\rangle \quad \text{(Erhaltung der Norm)}$$

Behauptung: $D(R) = D(R(\vec{\varphi})) = e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\varphi}\cdot\vec{L}}$ (d.h. ersetze $\vec{\lambda} \longrightarrow -\frac{i}{\hbar}\vec{L}$)

Unitarität: $D^+(R) = D^+(R(\vec{\varphi})) = e^{\frac{i}{\hbar}\vec{\varphi}\cdot\vec{L}^+} = e^{\frac{i}{\hbar}\vec{\varphi}\cdot\vec{L}} = D(-\vec{\varphi}) = D^{-1}(\varphi)$ ✓

Infinitesimal:

$$D(\delta\vec{\varphi})\psi(\vec{x}) \approx \left(1 - \frac{i}{\hbar}\,\delta\vec{\varphi}\cdot\vec{L}\right)\psi(\vec{x})$$

$$= \left(1 - \frac{i}{\hbar}\,\delta\vec{\varphi}\cdot\left(\vec{x}\times\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\right)\right)\psi(\vec{x})$$

$$= \left(1 - (\delta\vec{\varphi}\times\vec{x})\cdot\vec{\nabla}\right)\psi(\vec{x})$$

$$\underset{\text{Taylor}}{\approx} \psi(\vec{x} - \delta\vec{\varphi}\times\vec{x}) = \psi\left((\mathbb{1} - \delta\vec{\varphi}\cdot\vec{\Lambda})\vec{x}\right)$$

Die Manipulation des Kreuzprodukts sieht man dabei am besten in Komponenten:

$$\delta\vec{\varphi}\cdot(\vec{x}\times\vec{\nabla}) = \delta\varphi_i\,\varepsilon_{ijk}\,x_j\,\nabla_k = \varepsilon_{kij}\,\delta\varphi_i\,x_j\,\nabla_k = (\delta\vec{\varphi}\times\vec{x})\cdot\vec{\nabla}$$

Übergang zu endlichen $\varphi = m\,\delta\varphi$:

$$\lim_{m\to\infty}\left(1 - \frac{i}{\hbar}\frac{\vec{\varphi}}{m}\cdot\vec{L}\right)^m\psi(\vec{x}) = e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\varphi}\cdot\vec{L}}\psi(\vec{x}) = R\psi(\vec{x}) = \psi'(\vec{x})$$

$$= \lim_{m\to\infty}\psi\left(\left(\mathbb{1} - \frac{1}{m}\vec{\varphi}\cdot\vec{\Lambda}\right)^m\vec{x}\right) = \psi\left(e^{-\vec{\varphi}\cdot\vec{\Lambda}}\vec{x}\right) = \psi(R^{-1}\vec{x})$$

$$\longrightarrow \psi'(\vec{x}) = D(\vec{\varphi})\psi(\vec{x}) = e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\varphi}\cdot\vec{L}}\psi(\vec{x}) = \psi(R^{-1}\vec{x})$$

$\longrightarrow$

Die Operatoren $\frac{1}{\hbar}L_i$ sind Erzeugende von Drehungen.

Klassisch: Rotationsinvarianz von $H \longrightarrow$ Drehimpulserhaltung

Quantenmechanisch: Rotationsinvarianz eines Operators $A \longrightarrow$

$$\langle\psi|A|\varphi\rangle \overset{!}{=} \langle\psi'|A|\varphi'\rangle = \langle\psi|e^{\frac{i}{\hbar}\vec{\varphi}\cdot\vec{L}}A\,e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\varphi}\cdot\vec{L}}|\varphi\rangle$$

$$= \langle\psi|A|\varphi\rangle + \frac{i}{\hbar}\vec{\varphi}\cdot\langle\psi|[\vec{L},A]|\varphi\rangle + \mathcal{O}(\vec{\varphi}^2)$$

$\Longrightarrow [\vec{L},A] = 0 \longrightarrow \vec{L}$ und A sind simultan diagonalisierbar.

Ehrenfest für $[\vec{L},H] = 0 \longrightarrow \frac{d}{dt}\langle\vec{L}\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle[H,\vec{L}]\rangle = 0$

$\longrightarrow$ Es existieren simultane Eigenzustände von $L_z, \vec{L}^2$, $H = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + V(\vec{x})$, sofern $V(\vec{x})$ invariant unter Drehungen ist ($V(\vec{x}) \equiv V(|\vec{x}|)$).

<u>Fazit:</u>

Die Invarianz unter Translationen und Rotationen führt also in der Quantenmechanik zur Impuls- und Drehimpulserhaltung, ebenso wie in der klassischen Mechanik. Dies ist eine Konsequenz der Tatsache, daß der Impulsoperator Translationen bzw. der Drehimpulsoperator Rotationen erzeugt.

$\longrightarrow$ Quantenmechanische Version des klassischen Noether Theorems.

Wir verdeutlichen jetzt noch explizit, wie die <u>Drehung eines Zustandsvektors</u> geschieht:

$$|\psi'\rangle = \int d^3x\, |\vec{x}\rangle \underbrace{\langle \vec{x}|\psi'\rangle}_{=\psi'(\vec{x})} = \int d^3x\, |\vec{x}\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\varphi}\cdot\vec{L}}\, \psi(\vec{x})$$

$$= \underbrace{\int d^3x\, |\vec{x}\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\varphi}\cdot\vec{L}} \langle \vec{x}|}_{=D(\vec{\varphi})} \psi\rangle = D(\vec{\varphi})\,|\psi\rangle$$

oder andersherum

$$\vec{L}\,|\psi\rangle = \int d^3x\, |\vec{x}\rangle \frac{\hbar}{i}\, \vec{x}\times\vec{\nabla}\, \langle \vec{x}|\psi\rangle$$

$$\vec{L}^2 = \int d^3x \int d^3x'\, |\vec{x}\rangle \frac{\hbar}{i}\, \vec{x}\times\vec{\nabla}_x \underbrace{\langle \vec{x}|\vec{x}'\rangle}_{=\delta^3(\vec{x}-\vec{x}')} \frac{\hbar}{i}\, \vec{x}'\times\vec{\nabla}_{x'}\, \langle \vec{x}'|$$

$$= \int d^3x\, |\vec{x}\rangle \left(\frac{\hbar}{i}\, \vec{x}\times\vec{\nabla}_x\right)^2 \langle \vec{x}| \quad \text{etc.}$$

Der Übergang von Ortsraumoperatoren zu Operatoren im abstrakten Hilbertraum und die Hintereinanderausführung der Operatoren ($\longrightarrow$ Funktionen von Operatoren) kommutieren. Wie bereits vereinbart verwenden wir das gleiche Symbol für die Operatoren, unabhängig davon, welche Repräsentation des Hilbertraums (z.B. Orts- oder Impulswellenfunktionen, Dirac-Kets, ...) verwendet wird.

<u>Definition</u>

Sind $R \in G$ mit einer Gruppe G und ist $D: R \longmapsto D(R)$ eine Abbildung mit der Eigenschaft

$$D(R_2 R_1) = D(R_2) D(R_1) \quad \forall R_{1,2} \in G,$$

dann nennt man D eine <u>Darstellung</u> von G.

<u>Bemerkung</u>

$D(R(\vec{\varphi})) = e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\varphi}\cdot\vec{L}}$ ist eine Darstellung der Drehgruppe $SO(3)$.

Kommen wir zu den Kommutatoren aus 5.2 zurück.

Sei $\vec{A} = \vec{L}, \vec{p}, \vec{x}, \ldots$ ein <u>Vektoroperator</u>, so daß

$$\underbrace{\vec{A}' = e^{-\vec{\varphi}\cdot\vec{\mathcal{L}}}\vec{A}}_{\text{wegen } \psi'(\vec{x}) = \psi(e^{-\vec{\varphi}\cdot\vec{\mathcal{L}}}\vec{x})} \quad \text{oder infinitesimal: } A_i' = A_i - \varepsilon_{ijk}\,\delta\varphi_j A_k$$

Vergleiche mit: $A_i' = A_i - \frac{i}{\hbar}\delta\varphi_j [L_j, A_i]$

$$\left(\text{wegen } \langle\psi|\vec{A}|\varphi\rangle = \langle\psi'|\underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\varphi}\cdot\vec{L}}\vec{A}\,e^{\frac{i}{\hbar}\vec{\varphi}\cdot\vec{L}}}_{=\vec{A}'}|\varphi'\rangle\right)$$

$$\Longrightarrow -\frac{i}{\hbar}\delta\varphi_j [L_j, A_i] = -\varepsilon_{ijk}\,\delta\varphi_j A_k$$

$$\underset{\delta\varphi_j \text{ beliebig}}{\Longrightarrow} \quad [L_j, A_i] = -i\hbar\, \varepsilon_{ijk} A_k \Longleftrightarrow [L_i, A_j] = i\hbar\, \varepsilon_{ijk} A_k$$

Somit erklärt sich die beobachtete Struktur der grundlegenden Kommutatoren des Drehimpuls.

Für skalare (rotationsinvariante) Operatoren $S = \vec{x}^2, \vec{p}^2, \vec{L}^2, \ldots$ gilt dagegen:

$$S' = S = S - \frac{i}{\hbar}\, \delta\varphi_j\, [L_j, S] \Longrightarrow [L_j, S] = 0$$