4. Der Drehimpuls in der Quantenmechanik

Klassische Mechanik: Drehimpuls : $\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p}$.

Definiere den quantenmechanischen Drehimpuls durch

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{x}} \times \hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i}\, \vec{x} \times \vec{\nabla}$$

$$L_k = \frac{\hbar}{i}\, \varepsilon_{klm}\, x_l \frac{\partial}{\partial x_m} \equiv \varepsilon_{klm}\, x_l\, p_m$$

$$L_k^{+} = \varepsilon_{klm} (x_l p_m)^{+} = \varepsilon_{klm}\, p_m^{+} x_l^{+} = \varepsilon_{klm}\, p_m x_l$$

$$\underset{m \neq l}{=} \varepsilon_{klm}\, x_l\, p_m = L_k \qquad \left([p_m, x_l] = \frac{\hbar}{i} \delta_{ml} \right)$$

$$[L_1, L_2] = \varepsilon_{1jk}\, \varepsilon_{2lm} [x_j p_k, x_l p_m]$$

$$= \varepsilon_{1jk}\, \varepsilon_{2lm} \left\{ x_j [p_k, x_l] p_m + x_l [x_j, p_m] p_k \right\}$$

$$= \varepsilon_{1jk}\, \varepsilon_{2lm} \left\{ \frac{\hbar}{i} x_j p_m \delta_{kl} - \frac{\hbar}{i} x_l p_k \delta_{jm} \right\}$$

$$= \frac{\hbar}{i} \left\{ \underbrace{\varepsilon_{1jk}\, \varepsilon_{2km}}_{\substack{k \neq 1 \\ k \neq 2} \Big\} \Rightarrow k=3,\ j=2,\ m=1} x_j p_m - \underbrace{\varepsilon_{1jk}\, \varepsilon_{2lj}}_{\substack{j \neq 1 \\ j \neq 2} \Big\} j=3,\ k=2,\ l=1} x_l p_k \right\}$$

$$= \frac{\hbar}{i} \left\{ \varepsilon_{123}\, \varepsilon_{231}\, x_2 p_1 - \varepsilon_{132}\, \varepsilon_{213}\, x_1 p_2 \right\} = -\frac{\hbar}{i} (x_1 p_2 - x_2 p_1)$$

$= i\hbar L_3$

$[L_2, L_3] = i\hbar L_1 \quad , \quad [L_3, L_1] = i\hbar L_2$

$$\Rightarrow [L_i, L_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} L_k$$

$\Rightarrow$ Die Komponenten des Drehimpulses sind inkompatible Observable.

$\boxed{\text{Der Drehimpuls erzeugt Rotationen im Raum}}$

4.1 Rotationen im $\mathbb{R}^3$

$\vec{x}$: Vektor im $\mathbb{R}^3$

Rotation : $\vec{x}' = \underset{\sim}{R}\vec{x}$, $\underset{\sim}{R}$: reelle 3×3 Matrix

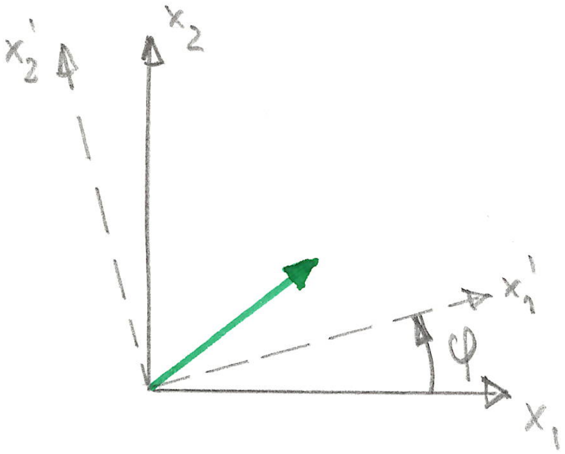
$$SO(3) = \{ \underset{\sim}{R} : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}^3 \mid \det \underset{\sim}{R} = +1, \ \underset{\sim}{R}^T \underset{\sim}{R} = \mathbb{1} \}$$

Rotation um Winkel φ um z-Achse
Konvention:

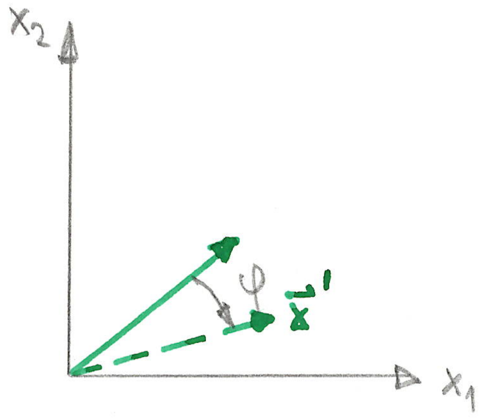
$$\underset{\sim}{R}_z(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi & 0 \\ -\sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Matrix beschreibt sowohl

Rotation der Koord. achsen um φ im Gegenuhrzeigersinn
" des Vektors " " im Uhrzeigersinn



passiv



aktiv

[In vielen Lehrbüchern ist der Drehsinn bei passiver & aktiver Rotation vertauscht: $\varphi \to -\varphi$

$$\rightarrow \quad \underset{\sim}{R}_z(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$]

Hier: benutze Konvention von Scheck

Falls $\vec{x} \to \vec{x}' = \underset{\sim}{R}\,\vec{x}$ was ist der Effekt der Rotation auf die Wellenfunktion $\psi_\alpha(\vec{x})$, bzw. ket $|\alpha\rangle$?

Isotropie: physikalischer Inhalt ändert sich nicht unter Rotationen, daher

$$\psi_\alpha'(\vec{x}') = \psi_\alpha(\vec{x})$$

(Rotierter Zustand betrachtet am rotierten Punkt ist invariant)

$$\Rightarrow \quad \psi_\alpha'(\vec{x}) = \psi_\alpha(\underset{\sim}{R}^{-1}\vec{x})$$
$$= \psi_\alpha(\underset{\sim}{R}(-\vec{\varphi})\,\vec{x})$$

Theorie II:

$$\underset{\sim}{R}(\vec{\varphi})\,\vec{x} = (\hat{\varphi}\cdot\vec{x})\,\hat{\varphi} - \hat{\varphi}\times\vec{x}\,\sin\varphi - \hat{\varphi}\times(\hat{\varphi}\times\vec{x})\cos\varphi$$

mit $|\hat{\varphi}| = 1$, $\hat{\varphi} = \vec{\varphi}/|\vec{\varphi}| \equiv \vec{\varphi}/\varphi$

Für eine Drehung um den infinitesimalen Winkel $\delta\vec{\varphi}$ gilt

$$\hat{\varphi} = \delta\vec{\varphi}/|\delta\vec{\varphi}|\,, \quad \sin(\delta\varphi) \simeq \delta\varphi \equiv |\delta\vec{\varphi}|, \; |\hat{\varphi}| = 1$$

$$\begin{aligned}
\underset{\sim}{R}(\delta\vec{\varphi})\,\vec{x} &= (\hat{\varphi}\cdot\vec{x})\,\hat{\varphi} - \delta\vec{\varphi}\times\vec{x} - \hat{\varphi}\times(\hat{\varphi}\times\vec{x}) \\
&= \cancel{(\hat{\varphi}\cdot\vec{x})\hat{\varphi}} - \delta\vec{\varphi}\times\vec{x} - \left(\cancel{(\hat{\varphi}\cdot\vec{x})\hat{\varphi}} - \vec{x}\right) \\
&= \vec{x} - \delta\vec{\varphi}\times\vec{x}
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow \underset{\sim}{R}(-\delta\vec{\varphi})\,\vec{x} = \vec{x} + \delta\vec{\varphi}\times\vec{x}$$

Also:

$$\begin{aligned}
\psi'(\vec{x}) &= \psi(\vec{x} + \delta\vec{\varphi}\times\vec{x}) \\
&= \psi(\vec{x}) + (\delta\vec{\varphi}\times\vec{x})\cdot\vec{\nabla}\psi(\vec{x}) + O(\delta\varphi^2) \\
&= \psi(\vec{x}) + \delta\vec{\varphi}\cdot(\vec{x}\times\vec{\nabla})\,\psi(\vec{x}) + O(\delta\varphi^2) \\
&= \left(1 + \frac{i}{\hbar}\,\delta\vec{\varphi}\cdot(\vec{x}\times\vec{p})\right)\psi(\vec{x}) + O(\delta\varphi^2) \\
&= \left(1 + \frac{i}{\hbar}\,\delta\vec{\varphi}\cdot\vec{L}\right)\psi(\vec{x}) + O(\delta\varphi^2)
\end{aligned}$$

Man kann sich eine Drehung um endlichen Winkel $\vec{\varphi}$ aus vielen infinitesimalen Drehungen um $\delta\vec{\varphi} = \vec{\varphi}/N$ zusammengesetzt denken:

$$\psi'(\vec{x}) = \left(1 + \frac{i}{\hbar}\,\frac{\vec{\varphi}}{N}\cdot\vec{L}\right)^N \psi(\vec{x}) \to \exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{\varphi}\cdot\vec{L}\right)\psi(\vec{x})$$

$$\Rightarrow \psi'(\vec{x}) = D(\underset{\sim}{R})\,\psi(\vec{x}) \quad \text{mit} \quad D(\underset{\sim}{R}) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{\varphi}\cdot\vec{L}\right)$$

$D(\underset{\sim}{R})$ ist ein Operator auf $\mathcal{H}$ der die Drehung des Zustandes beschreibt.

$D(\underset{\sim}{R}) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\,\vec{\varphi}\cdot\vec{L}\right)$ ist eine unitäre Darstellung der Gruppe SO(3) auf dem Hilbertraum $\mathcal{H}$. $D(\underset{\sim}{R})$ ist ein Operator auf $\mathcal{H}$.

Allgemein: $|\psi'\rangle = D(\underset{\sim}{R})\,|\psi\rangle$

$\underset{\sim}{R}$ wirkt auf 3-komponentige Vektoren im $\mathbb{R}^3$

$D(\underset{\sim}{R})$ " " Kets in $\mathcal{H}$

Dimension von $D(\underset{\sim}{R})$ hängt von der Dimension von $\mathcal{H}$ ab.

Darstellungen der SO(3) erfüllen dieselben Eigenschaften wie die Gruppe selbst:

Neutrales Element: $\underset{\sim}{R}\cdot\mathbb{1}_{3\times3} = \underset{\sim}{R} \Rightarrow D(\underset{\sim}{R})\cdot\mathbb{1} = D(\underset{\sim}{R})$

Abgeschlossenheit: $\underset{\sim}{R}_1\underset{\sim}{R}_2 = \underset{\sim}{R}_3 \Rightarrow D(\underset{\sim}{R}_1)D(\underset{\sim}{R}_2) = D(\underset{\sim}{R}_3)$

Inverses Element: $\underset{\sim}{R}\cdot\underset{\sim}{R}^{-1} = \mathbb{1} \Rightarrow D(\underset{\sim}{R})\,D(\underset{\sim}{R})^{-1} = \mathbb{1}$

$\underset{\sim}{R}^{-1}\cdot\underset{\sim}{R} = \mathbb{1} \Rightarrow \ldots$

Assoziativität: $\underset{\sim}{R}_1(\underset{\sim}{R}_2\underset{\sim}{R}_3) = (\underset{\sim}{R}_1\underset{\sim}{R}_2)\underset{\sim}{R}_3 = \underset{\sim}{R}_1\underset{\sim}{R}_2\underset{\sim}{R}_3$

$\Rightarrow D(\underset{\sim}{R}_1)\left(D(\underset{\sim}{R}_2)\,D(\underset{\sim}{R}_3)\right) = \left(D(\underset{\sim}{R}_1)\,D(\underset{\sim}{R}_2)\right)D(\underset{\sim}{R}_3) = \ldots$

Der **Erwartungswert** ändert sich bei Drehung **nicht**:

$$\langle\psi'|A'|\psi'\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle$$

$$= \underbrace{\langle\psi|D(\underset{\sim}{R})^\dagger}_{\langle\psi'|} D(\underset{\sim}{R})\, A\, \overbrace{D(\underset{\sim}{R})^\dagger \underbrace{D(\underset{\sim}{R})|\psi\rangle}_{|\psi'\rangle}}^{\mathbb{1}}$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{A' = D(\underset{\sim}{R})\, A\, D(\underset{\sim}{R})^\dagger}$$

Für eine infinitesimale Rotation gilt:

$$A' = \left(\mathbb{1} + \frac{i}{\hbar}\delta\vec{\varphi}\cdot\vec{L}\right) A \left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\delta\vec{\varphi}\cdot\vec{L}\right)$$

$$= A + \frac{i}{\hbar}\left[\delta\vec{\varphi}\cdot\vec{L}, A\right] + O(\delta\vec{\varphi}^2)$$

Ist A rotationsinvariant, d.h. $A' = A$, so gilt

$$\boxed{A' = A \quad \Leftrightarrow \quad [L_j, A] = 0, \quad j = 1,2,3}$$

(Beispiele auf folgender Seite)

Infinitesimale Rotation:

$$D(\hat{\varphi}, \delta\varphi) = \mathbb{1} + \frac{i}{\hbar}(\hat{\varphi}\cdot\vec{L})\,\delta\varphi$$

$\hat{\varphi}$: Richtung der Drehachse ; $|\hat{\varphi}| = 1$

$\delta\varphi$: Drehwinkel

Vorzeichen so definiert, dass <u>passive</u> Rotation der Achsen um $\hat{\varphi}$ einer <u>Rechtsschraube</u> entspricht.

Beispiele für rotationsinvariante Operatoren

$$[\vec{p}^{\,2}, L_j] = 0, \qquad [\vec{x}^{\,2}, L_j] = 0, \qquad [\vec{L}^{2}, L_j] = 0$$

Letzte Gleichung besagt: nur das Quadrat von $\vec{L}$ plus eine Komponente können gleichzeitig scharf gemessen werden. Die übrigen Komponenten haben keinen scharf definierten Wert.

↷ man wählt typischerweise $\vec{L}^2$ und L_3

Weitere nützliche Kommutatoren:

$$[L_i, x_j] = i\hbar\, \varepsilon_{ijk}\, x_k, \qquad [L_i, p_j] = i\hbar\, \varepsilon_{ijk}\, p_l$$

$$[L_i, r] = 0$$

Beweis: Übung

$$[L_i, x_j] = \varepsilon_{ikl}\,[x_k p_l, x_j] = \varepsilon_{ikl}\, x_k\, [p_l, x_j]$$
$$= \varepsilon_{ikl}\, x_k\, \frac{\hbar}{i}\, \delta_{lj} = \varepsilon_{ikj}\, x_k\, \frac{\hbar}{i} = i\hbar\, \varepsilon_{ijk}\, x_k$$

$$[L_i, p_j] = \varepsilon_{ikl}\,[x_k p_l, p_j] = \varepsilon_{ikl}\,[x_k, p_j]\, p_l$$
$$= i\hbar\, \varepsilon_{ijl}\, p_l$$

$$[L_i, r] = \varepsilon_{ijk} \left[x_j p_k , \left(\sum_m x_m^2 \right)^{1/2} \right]$$

$$= \frac{\hbar}{i} \varepsilon_{ijk} x_j \left[\frac{\partial}{\partial x_k} , \left(\sum_m x_m^2 \right)^{1/2} \right]$$

$$= \frac{\hbar}{i} \varepsilon_{ijk} x_j \left\{ \cancel{\frac{1}{2}} \left(\sum_m x_m^2 \right)^{-1/2} \sum_m \cancel{2} x_m \delta_{km} + r \frac{\partial}{\partial x_k} - r \frac{\partial}{\partial x_k} \right\}$$

$$= \frac{\hbar}{i} \varepsilon_{ijk} x_j \frac{1}{r} x_k = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \underbrace{\varepsilon_{ijk}}_{\text{anti-symm.}} \underbrace{x_j x_k}_{\text{symm.}} = 0$$

$\blacksquare$

$[L_i, r] = 0 \Rightarrow L_i$ vertauscht auch mit jeder diff.baren Funktion von r.

Ist also $V = V(r)$ ein Zentralpotential, so gilt wg. $[\vec{p}^2, L_i] = [r, L_i] = 0$ für

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(r) \quad \text{auch} \quad [H, L_i] = 0$$

d.h. H und L_i sind kompatibel, und wg. $[\vec{L}^2, L_i] = 0$ sind auch H und $\vec{L}^2$ kompatibel,

d.h. $[H, \vec{L}^2] = 0$

↳ Betrag und alle Komponenten von $\vec{L}$ sind Erhaltungsgrößen.