10. Tutorium

Sonntag, 9. Januar 2022 14:42

Drehimpulse in der Quantenmechanik

- Warum brauchen wir das überhaupt?
  - Beschreibung von Atomen (Vorlesung: Wasserstoffatom)
  - Klassifizierung von Atom- und Molekülspektren
    - ↳ Termschema
    - ↳ Auswahlregeln
  - Beschreibung von Spins als Drehimpuls

- elegante Beschreibung von Zentralpotentialen (bspw. Coulomb-Kraft)

klassisch: $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \quad \Leftrightarrow \quad \hat{L} = \hat{r} \times \hat{p}$ Quantenmechanisch

$$\vec{L} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y p_z - z p_y \\ z p_x - x p_z \\ x p_y - y p_x \end{pmatrix}$$

- wir definieren analog den Drehimpuls Operator $\hat{L} = \begin{pmatrix} \hat{L}_x \\ \hat{L}_y \\ \hat{L}_z \end{pmatrix}$ mit $\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y$

allgemein: $\hat{L}_i = \varepsilon_{ijk} \hat{r}_j \hat{p}_k$

- für Rechnungen sind die Kommutatorregeln praktisch

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = [\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z]$$

$$= [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z] - [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z]$$

$$= \underbrace{[\hat{y}\hat{p}_z, \hat{z}\hat{p}_x]}_{\text{nur der Term mit } [\hat{p}_z, \hat{z}] \text{ bleibt}} - \underbrace{[\hat{y}\hat{p}_z, \hat{x}\hat{p}_z]}_{=0} - \underbrace{[\hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x]}_{=0} + \underbrace{[\hat{z}\hat{p}_y, \hat{x}\hat{p}_z]}_{\text{nur der Term } [\hat{z}, \hat{p}_z] \text{ bleibt}}$$

alle Operatoren kommutieren jeweils

$$= \hat{y} \underbrace{[\hat{p}_z, \hat{z}]}_{-i\hbar} \hat{p}_x + \hat{x} \underbrace{[\hat{z}, \hat{p}_z]}_{i\hbar} \hat{p}_y$$

$$[AB, CD] = A[B, CD] + [A, CD]B$$
$$= A[B,C]D + AC[B,D] + C[A,D]B + [A,C]DB$$

$$= i\hbar(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x) = i\hbar \hat{L}_z$$

allgemein: $\boxed{[L_i, L_j] = \varepsilon_{ijk}\, i\hbar\, \hat{L}_k}$

- wir sehen, dass die L_i Komponenten nicht kommutieren. Bisher haben „gleiche" Operatoren immer kommutiert $[x_i, x_j] = 0 \quad [p_i, p_j] = 0$

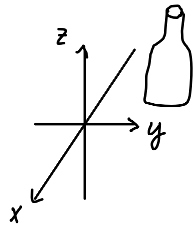
· wir sehen, dass die L_i Komponenten nicht kommutieren. Bisher haben „gleiche" Operatoren immer kommutiert $[x_i, x_j] = 0$ $[p_i, p_j] = 0$

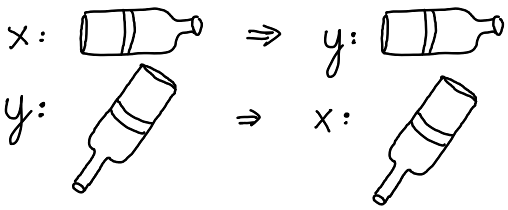
· Was bedeutet das also?

⇒ Drehimpulse beschreiben Drehungen im Raum

↳ Drehungen kommutieren im Allgemeinen nicht miteinander

· Drehung der Flasche um 90° zuerst um x-Achse, dann y-Achse





⇒ Rotationsoperator: $U_R(\vec{n}, \alpha) = e^{-i\alpha \frac{\vec{n}\cdot\hat{L}}{\hbar}}$ unitär

Weiterer wichtiger Operator: $\boxed{\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2}$

· Eigenschaften: hermitesch ($\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ sind ebenfalls hermitesch)

· Kommutatorrelationen:

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = [\hat{L}_x^2, \hat{L}_z] + [\hat{L}_y^2, \hat{L}_z] + \underbrace{\cancel{[\hat{L}_z^2, \hat{L}_z]}}_{0}$$

$$= \hat{L}_x \underbrace{[\hat{L}_x, \hat{L}_z]}_{-i\hbar \hat{L}_y} + \underbrace{[\hat{L}_x, \hat{L}_z]}_{-i\hbar \hat{L}_y} \hat{L}_x + \hat{L}_y \underbrace{[\hat{L}_y, \hat{L}_z]}_{i\hbar \hat{L}_x} + \underbrace{[\hat{L}_y, \hat{L}_z]}_{i\hbar \hat{L}_x} \hat{L}_y$$

$$= i\hbar \left[-\cancel{\hat{L}_x \hat{L}_y} - \cancel{\hat{L}_y \hat{L}_x} + \cancel{\hat{L}_y \hat{L}_x} + \cancel{\hat{L}_x \hat{L}_y} \right] = 0$$

⇒ $\hat{L}^2$ vertauscht mit allen Komponenten von $\hat{L}$

Beschreibung von Zentralpotentialen

- Merkmal: $V(\vec{r}) = V(r)$ rotationssymmetrisches Potential
- es gilt $[\hat{H}, \hat{L}] = 0$ ⇒ der Drehimpuls ist zeitlich erhalten
  ⇒ Beschreibung der Eigenzustände durch die zeitunabhängige Schrödingergleichung

Beweis: Transformation eines allgemeinen Operators unter Drehung

$$\hat{A} \mapsto \hat{A}' = \hat{U}_R^\dagger(\vec{n}, \alpha)\, \hat{A}\, \hat{U}_R(\vec{n}, \alpha)$$

$$\hat{A} \mapsto \hat{A}' = \hat{U}_R^+(\vec{n},\alpha)\, \hat{A}\, \hat{U}_R(\vec{n},\alpha)$$
$$= e^{i\alpha \frac{\vec{n}\cdot\hat{L}}{\hbar}}\, \hat{A}\, e^{-i\alpha \frac{\vec{n}\cdot\hat{L}}{\hbar}}$$

| wende BCH-Formel an: $e^{B} A e^{-B} = A + [B,A] + \frac{1}{2}[B,[B,A]] + \dots$

$$= \hat{A} + \frac{i\alpha}{\hbar}[\vec{n}\cdot\hat{L}, \hat{A}] + \dots$$

Für ein Zentralpotential bleibt $\hat{H}$ unverändert unter Rotation

$$\hat{H}' = \hat{H} + \frac{i\alpha}{\hbar}\underbrace{[\vec{n}\cdot\hat{L}, \hat{H}]}_{=0} + \dots \qquad \Rightarrow [\hat{L}, \hat{H}] = 0$$

$\square$

Schrödinger Gleichung: $E\,\Psi(\vec{r}) = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r})\right)\Psi(\vec{r})$ (spinloses Teilchen)

- Suche nach Eigenlösungen des Hamilton-Operators
  ↳ Aber: dreidimensionales Problem, wir benötigen weitere Operatoren zur Beschreibung der Eigenzustände

⇒ verwende $\hat{L}^2$ und $\hat{L}_z$
  ↳ diese bilden zusammen mit $\hat{H}$ einen vollständigen Satz kommutierender Obervablen → besitzen gleiche Eigenvektoren die eine Basis aufspannen

für einen Eigenzustand gilt:
$$\hat{H}|\Psi\rangle = E_n|\Psi\rangle$$
$$\hat{L}^2|\Psi\rangle = \lambda\hbar^2|\Psi\rangle = \ell(\ell+1)\hbar^2|\Psi\rangle$$
$$\hat{L}_z|\Psi\rangle = m\hbar|\Psi\rangle$$

⇒ daher bezeichnet man die Eigenzustände auch mit $|\Psi\rangle = |n\ell m\rangle$

- Wie beim harmonischen Oszillator führen wir nun wieder Leiteroperatoren ein

$$\boxed{\begin{aligned}\hat{L}_+ &= \hat{L}_x + i\hat{L}_y \\ \hat{L}_- &= \hat{L}_x - i\hat{L}_y\end{aligned}}$$

- nicht hermitesch $(\hat{L}_+)^+ = \hat{L}_-$

- Kommutatorregeln:

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] = \underbrace{[\hat{L}_z, \hat{L}_x]}_{i\hbar\hat{L}_y} \pm i\underbrace{[\hat{L}_z, \hat{L}_y]}_{-i\hbar\hat{L}_x} = i\hbar\hat{L}_y \pm \hbar\hat{L}_x = \pm\hbar[\pm i\hat{L}_y + \hat{L}_x]$$
$$= \underline{\underline{\pm\hbar\hat{L}_\pm}}$$

betrachte Wirkung von $\hat{L}_\pm$ auf $|\ell m\rangle$ (Index k wird weggelassen) betrachte Wirkung von $\hat{L}_\pm$ auf $|lm\rangle$ (Index k wird weggelassen)

$$\hat{L}_z \hat{L}_\pm |lm\rangle = \Big(\underbrace{[\hat{L}_z, \hat{L}_\pm]}_{\pm\hbar \hat{L}_\pm} + \hat{L}_\pm \hat{L}_z \Big) |lm\rangle$$

$$= (\pm\hbar \hat{L}_\pm + m\hbar \hat{L}_\pm)|lm\rangle = \hbar(m\pm 1)\, \hat{L}_\pm |lm\rangle$$

Vergleiche mit $\hat{L}_z |l\, m\pm1\rangle = \hbar(m\pm1) \Rightarrow \hat{L}_\pm |lm\rangle = \alpha\, |l\, m\pm1\rangle$

Wichtig: Die Wirkung von $\hat{L}_\pm$ ändert den Wert von l nicht!

$$\hat{L}^2 |lm\rangle = \underbrace{(\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2)|lm\rangle}_{>0 \text{ da hermitesch}} + \underbrace{\hat{L}_z^2}_{\hbar^2 m^2} |lm\rangle = l(l+1)\hbar^2 |lm\rangle$$

$\Rightarrow l(l+1) \geq m^2$ m ist durch den Wert von l begrenzt!

$\Rightarrow$ es muss ein m_{max} geben, sodass

$$\hat{L}_+ |l\, m_{max}\rangle = 0$$

vgl. harmon. Oszillator

Um das m_{max} zu finden, schreiben wir $\hat{L}^2$ etwas um mithilfe von $\hat{L}_-\hat{L}_+$

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

$$\Rightarrow \boxed{\hat{L}^2 = \hat{L}_-\hat{L}_+ + \hbar \hat{L}_z + \hat{L}_z^2}$$

$$\Rightarrow \hat{L}^2 |l\, m_{max}\rangle = \hat{L}_- \underbrace{\hat{L}_+ |l, m_{max}\rangle}_{=0} + \hbar \underbrace{\hat{L}_z |l\, m_{max}\rangle}_{=\hbar m_{max} |l\, m_{max}\rangle} + \underbrace{\hat{L}_z^2 |l\, m_{max}\rangle}_{=\hbar^2 m_{max} |l\, m_{max}\rangle}$$

Definition

$$= \hbar^2 m_{max}(m_{max}+1)\,|l\, m_{max}\rangle$$

$$= \hbar^2 l(l+1)\,|l\, m_{max}\rangle$$

$\Rightarrow l = m_{max}$ (analog für $m_{min} = -l$)

$\Rightarrow$ $\boxed{-l, -l+1, \dots, m, \dots, l-1, l}$ $-l \leq m \leq l$

$\Rightarrow 2l \in \mathbb{N}$ damit $l \in \{0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots\}$