

## 6 Symmetrien in der Quantenmechanik

Symmetrien spielen eine große Rolle in der Physik. Zum einen liefern Symmetrien große Hilfestellung bei der Konstruktion einer geeigneten Beschreibung eines Systems (z.B. in Form von Bewegungsgleichungen). Zum anderen sind Symmetrien über das Noether-Theorem direkt mit Erhaltungsgrößen verknüpft, die oft die Lösung eines Systems stark vereinfachen.

In der Quantenmechanik verstehen wir unter Symmetrie die Eigenschaft eines Systems, unter bestimmten Transformationen die Wahrscheinlichkeiten und Eigenwerte von Observablen zu erhalten.

Eine Symmetrie ist also eine Abbildung  $\Gamma$  die bijektiv auf dem Raum der (physikalisch realisierbaren) Zustände wirkt und die

Übergangswahrscheinlichkeiten erhält:

$$|\langle \phi | \psi \rangle|^2 = |\langle \Gamma \phi | \Gamma \psi \rangle|^2 \quad (6.1)$$

Wir haben bereits bei den Translationen und Zeitentwicklungen gesehen, dass unitäre Operatoren eine solche Wahrscheinlichkeitserhaltende Eigenschaft haben.

(NB: in der Tat besagt das Wigner-Theorem, dass  $\Gamma$  entweder linear unitär oder anti-linear antiunitär sein muss, vgl. Galindo & Pascual, Quantum Mechanics I).

Im Folgenden werden wir neben den bereits diskutierten Translationen und der Zeitentwicklung noch weitere wichtige Symmetrien vorstellen.

## 6.1 Raumspiegelungen

Unter einer Raumspiegelung bzw. Paritäts-Transformation  $P$  ändert sich das Vorzeichen

aller Koordinaten

$$P: \vec{x}' \rightarrow -\vec{x}' \quad (6.2)$$

Nun muss ein unitärer Operator existieren, der diese Raumspiegelung auf dem QM Zustandsraum implementiert:

$$|\psi\rangle \rightarrow |\tilde{\psi}\rangle = \Gamma(P) |\psi\rangle, \quad \Gamma^\dagger(P) = \Gamma^{-1}(P) \quad (6.3)$$

Für Operatoren muss gelten

$$\tilde{A} = \Gamma(P) A \Gamma^\dagger(P). \quad (6.4)$$

Im Ortsraumdarstellung ergibt sich

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}(\vec{x}') &= \langle \vec{x}' | \tilde{\psi} \rangle = \langle \vec{x}' | \Gamma(P) | \psi \rangle \\ &= \langle -\vec{x}' | \psi \rangle = \psi(-\vec{x}'), \end{aligned} \quad (6.5)$$

d.h.  $\langle \vec{x}' | \Gamma(P) \equiv \langle -\vec{x}' |$ . Im Ortsraum lässt sich die Unitarität von  $\Gamma(P)$  direkt nachweisen:

$$\langle \tilde{\psi}_1 | \tilde{\psi}_2 \rangle = \langle \tilde{\psi}_1 | \Gamma(P)^\dagger \Gamma(P) | \psi_2 \rangle$$

$$\begin{aligned}
&= \int d^3\vec{x}' \langle \hat{\Psi}_1 | \Gamma(\mathbb{P})^\dagger | \vec{x}' \rangle \langle \vec{x}' | \Gamma(\mathbb{P}) | \Psi_2 \rangle \\
&= \int d^3\vec{x}' \Psi_1^*(-\vec{x}') \Psi_2(-\vec{x}') \\
&\stackrel{\vec{x}' \rightarrow -\vec{x}'}{=} \int d^3\vec{x}' \Psi_1^*(\vec{x}') \Psi_2(\vec{x}') \equiv \langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle, \quad (6.6)
\end{aligned}$$

Wegen  $\Psi_1, \Psi_2$  bel. folgt in der Tat  $\Gamma(\mathbb{P})^\dagger = \Gamma(\mathbb{P})^{-1}$ .

Desweiteren gilt:

$$\begin{aligned}
\tilde{\Psi}(\vec{x}') &= \langle \vec{x}' | \Gamma(\mathbb{P}) \Gamma(\mathbb{P}) | \Psi \rangle = \langle \vec{x}' | \Gamma(\mathbb{P}) | \hat{\Psi} \rangle \\
&= \tilde{\Psi}(-\vec{x}') = \Psi(\vec{x}'), \quad (6.7)
\end{aligned}$$

d.h.  $\Gamma(\mathbb{P})^2 = \mathbb{1}$ . (6.8)

Die Eigenwerte von  $\Gamma(\mathbb{P})$  können also nur 1 oder -1 sein.

Die Eigenfunktionen zum Eigenwert 1 sind damit gerade, zum Eigenwert -1 also ungerade Funktionen:

$$\begin{aligned}
\tilde{\Psi}(\vec{x}') &= \Psi(-\vec{x}') = \Psi(\vec{x}') \text{ gerade} \\
\hat{\Psi}(\vec{x}') &= \Psi(-\vec{x}') = -\Psi(\vec{x}') \text{ ungerade}
\end{aligned} \quad (6.9)$$

Für einen Hamilton-Operator der Form  $H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x})$   
mit einem Potential der Eigenschaft

$$V(\vec{x}) = V(-\vec{x}) \quad (6.10)$$

gilt wegen

$$\tilde{\vec{x}} = \Gamma(P) \vec{x} \Gamma(P) = -\vec{x}, \quad (6.11)$$

(und für entwickelbare Funktionen

$$\tilde{f}(\vec{x}) = \Gamma(P) f(\vec{x}) \Gamma(P)^{-1} = f(-\vec{x}), \quad (6.12)$$

dass

$$\begin{aligned} \tilde{H}(\vec{x}, \vec{p}) &= \Gamma(P) H(\vec{x}, \vec{p}) \Gamma(P)^{-1} \\ &= H(-\vec{x}, -\vec{p}) \stackrel{(6.10)}{\equiv} H(\vec{x}, \vec{p}). \end{aligned} \quad (6.12)$$

$$\Rightarrow \Gamma(P) H(\vec{x}, \vec{p}) = H(\vec{x}, \vec{p}) \Gamma(P), \quad (6.13)$$

D.h. falls  $V$  (entwickelbar ist und) gerade ist,

vertauscht  $H$  mit  $\Gamma(P)$ . Es gibt dann gemeinsame  
Eigenfunktionen mit Eigenwerten  $(+1)$  oder  $(-1)$ ,

d.h. die Eigenfunktionen von  $H$  sind entweder gerade oder ungerade. Diese Eigenschaft haben wir bereits beim harmonischen Oszillator sowie beim symmetrischen Potentialtopf explizit verifiziert.

## 8.2 Translationen

Wir haben bereits den Translationsoperator  $T(\vec{a})$  kennengelernt, der mit der Verschiebung des Ortes eines Teilchens verknüpft ist:

$$\vec{x} \rightarrow \vec{x} + \vec{a}. \quad (6.14)$$

Die Koordinaten-Translationen (6.14) bilden eine 3-dimensionale kontinuierliche Liegruppe. Die Gruppe ist abelsch, weil zwei beliebige Translationen kommutieren. Die Translationsgruppe wird parametrisiert durch die Verschiebung  $\vec{a}$ , d.h. die Gruppe ist isomorph zum Vektorraum  $\mathbb{R}^3$ .

Den auf Zustandsvektoren und Operatoren wirkenden Translationsoperator haben wir bereits kennengelernt:

$$|\psi\rangle \rightarrow |\tilde{\psi}\rangle = T(\vec{a})|\psi\rangle$$

$$A \rightarrow \tilde{A} = T(\vec{a}) A T(\vec{a})^{-1} \quad (6.15)$$

Im Ortsraum gilt z. B.

$$\psi(\vec{x}') \rightarrow \tilde{\psi}(\vec{x}') = \langle \vec{x}' | T(\vec{a}) | \psi \rangle = \psi(\vec{x}' - \vec{a}) \quad (6.16)$$

Die Darstellung von  $T(\vec{a})$  mit Hilfe des Impulsoperators  $\vec{p}$

$$T(\vec{a}) = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{a}} \quad (6.17)$$

zeigt die Unitarität von  $T(\vec{a})$  manifest. Die Abbildung

$$\vec{a} \rightarrow T(\vec{a}) \quad (6.18)$$

ist eine Abbildung der Gruppe  $\mathbb{R}^3$  der Translationen in eine Gruppe von unitären Operatoren (6.17) auf dem QM Zustandsraum (NB: man spricht dabei von einem Gruppenhomomorphismus).

$$T(\vec{a} + \vec{b}) = T(\vec{a}) T(\vec{b}) = T(\vec{b}) T(\vec{a}), \quad T(\vec{a})^{-1} = T(-\vec{a}).$$

$T(\vec{a})$  ist eine unitäre Darstellung der Translationen auf dem Hilbertraum.  $\underbrace{\hspace{10em}}$  (6.19)

Die abelsche Natur der Translationen,  $\vec{x} \rightarrow \vec{x} + \vec{a} + \vec{b}$   
 $= \vec{x} + \vec{b} + \vec{a}$ , überträgt sich auf  $T(\vec{a})$ :

$$[T(\vec{a}), T(\vec{b})] = 0 \quad \forall \vec{a}, \vec{b} \quad (6.20)$$

Wann vertauscht  $H$  mit  $T(\vec{a})$ ? Wegen

$$H \rightarrow T(\vec{a}) H(\vec{x}, \vec{p}) T(\vec{a})^{-1} = H(\vec{x} - \vec{a}, \vec{p}) \quad (6.21)$$

ist  $H$  von der Form  $H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x})$  genau  
 dann Translationsinvariant, wenn

$$V(\vec{x} + \vec{a}) = V(\vec{x}) \quad \forall \vec{a} \quad (6.22)$$

ist. Dies ist also nur für konstante Potentiale  
 erfüllt,  $V = \text{const}$ . D.h. nur in Abwesenheit von  
 äußeren Kräften ist der Hamilton-Operator für eine  
 Teilchen translationsinvariant. Nur für diesen  
 Fall gilt dann  $[\vec{p}, H] = 0$ , so dass der  
 Impuls eine Konstante der Bewegung ist, denn

$$H = T(\vec{a}) H T(\vec{a})^{-1} = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{a}} H e^{+\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{a}} = H - \frac{i}{\hbar} \underbrace{[\vec{p}, H]}_{=0} \cdot \vec{a} + \dots$$



Betrachten wir jedoch ein QM System mit  $N$  Teilchen und einem Hamiltonoperator

$$H = \left( \sum_{i=1}^N \frac{\vec{P}_i^2}{2m_i} \right) + V(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) \quad (6.23)$$

Unter Translationen verschieben sich alle Koordinaten,

$$\begin{aligned} T(\vec{a}) H T^{-1}(\vec{a}) &= T(\vec{a}) H(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N, \vec{P}_1, \dots, \vec{P}_N) T^{-1}(\vec{a}) \\ &= H(\vec{x}_1 - \vec{a}, \dots, \vec{x}_N - \vec{a}, \vec{P}_1, \dots, \vec{P}_N), \end{aligned} \quad (6.24)$$

so dass der Translationsoperator die Gestalt hat

$$T(\vec{a}) = \prod_i T_i(\vec{a}) = \prod_i e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{P}_i \cdot \vec{a}} = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{P} \cdot \vec{a}}, \quad (6.25)$$

d.h. den Gesamtimpuls  $\vec{P} = \vec{P}_1 + \dots + \vec{P}_N$  enthält.

Der Hamilton-Operator ist nun translationsinvariant, wenn

$$V(\vec{x}_1 + \vec{a}, \dots, \vec{x}_N + \vec{a}) = V(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N). \quad (6.26)$$

Dies ist nicht nur für konstante Potentiale erfüllt.

Es genügt, wenn  $V$  z.B. nur von den Teilchenabständen abhängt; bzw. allgemeiner

$$H = \sum_i \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} + \sum_{i < j} V_{ij}(|\vec{x}_i - \vec{x}_j|) \quad (6.27)$$

Dies beschreibt also ein translationsinvariantes System, bei dem wegen  $H = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{P} \cdot \vec{a}} H e^{\frac{i}{\hbar} \vec{P} \cdot \vec{a}}$

$\Rightarrow [\vec{P}, H] = 0$  der Gesamtimpuls eine

Konstante der Bewegung ist.

Ein wichtiges Beispiel dieser Art ist die

Coulomb-Wechselwirkung  $V_{ij} \sim \frac{1}{|\vec{x}_i - \vec{x}_j|}$ , die

im Wasserstoffatom eine zentrale Rolle spielt.

(und in allen anderen Atomen natürlich auch ...)

## 6.3 Drehungen

Eine weitere Klasse wichtige Symmetrien in vielen physikalischen Systemen sind die Drehungen.

Im Gegensatz zu den Translationen, hängt das Ergebnis von hintereinander ausgeführten Drehungen i. A. von der Reihenfolge der einzelnen Drehungen ab. Übertragen in die QM erwarten wir also, dass die zugehörigen Operatoren nicht mehr vertauschen.

### 6.3.1 Unitäre Darstellungen der Drehungen

Drehungen im Ortsraum werden beschrieben durch orthogonale Drehmatrizen  $R$

$$\vec{x} \rightarrow \tilde{\vec{x}} = R \vec{x} \quad (6.28)$$

mit

$$R^T = R^{-1} \quad (6.29)$$

so dass das Skalarprodukt invariant bleibt

$$(R\vec{x}) \cdot (R\vec{y}) = \vec{x} \cdot R^T R \vec{y} = \vec{x} \cdot \vec{y}.$$

Die Menge aller Drehungen bilden die spezielle orthogonale Gruppe  $SO(3)$  der eigentlichen Drehungen im Raum.

Wir definieren die Wirkung von Drehungen auf die Wellenfunktion im Ortsraum wie folgt

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{x}') &\rightarrow \tilde{\Psi}(\vec{x}') = \langle \vec{x}' | \Gamma(R) | \Psi \rangle \\ &= \Psi(R^{-1}\vec{x}') \end{aligned} \quad (6.30)$$

(NB: aus Konventionsgründen bzw. Kompatibilitätsgründen mit der Literatur definieren wir die Drehungen der Wellenfunktionen als Rückwärtsdrehungen im Ortsraum, vgl.  $\langle \vec{x}' | T(a) | \Psi \rangle = \Psi(\vec{x}' - a)$ )

$\Gamma(R)$  ist unitär, weil sich das Integrationsmaß im Skalarprodukt bei Drehungen nicht ändert:

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\Psi} | \tilde{\Phi} \rangle &= \int d^3\vec{x}' \tilde{\Psi}^*(\vec{x}') \tilde{\Phi}(\vec{x}') = \int d^3\vec{x}' \Psi^*(R^{-1}\vec{x}') \Phi(R^{-1}\vec{x}') \\ &\stackrel{\vec{y}' = R^{-1}\vec{x}'}{=} \int d^3\vec{y}' \Psi^*(\vec{y}') \Phi(\vec{y}') = \langle \Psi | \Phi \rangle \end{aligned} \quad (6.31)$$

Wegen  $\langle \tilde{\Psi} | \tilde{\Phi} \rangle = \langle \Psi | \Gamma^\dagger(R) \Gamma(R) | \Phi \rangle$  für  $|\Psi\rangle, |\Phi\rangle$  bel.

muss  $\Gamma(R)$  unitär sein,  $\Gamma^\dagger(R) = \Gamma^{-1}(R)$

(oder antiunitär). Die Abbildung  $R \rightarrow \Gamma(R)$

ist eine Darstellung der Drehgruppe im QM Zustandsraum

$$\Gamma(R_1 R_2) = \Gamma(R_1) \Gamma(R_2),$$

$$\Gamma(R^{-1}) = \Gamma^{-1}(R) \quad (6.32)$$

$$\Gamma(\mathbb{1}_3) = \mathbb{1} \quad \begin{array}{c} \uparrow \\ \text{Ortsraum} \end{array} \quad \begin{array}{c} \uparrow \\ \text{Zustandsraum} \end{array}$$

Zwei Drehungen kommutieren i. A. nicht  $[R_1, R_2] \neq 0$ ,  
so dass auch  $[\Gamma(R_1), \Gamma(R_2)] \neq 0$  i. A.

Wann vertauscht der Hamilton-Operator mit den Drehungen? Seine Transformation lautet

$$\Gamma(R) H(\vec{x}, \vec{p}) \Gamma^{-1}(R) = H(R^{-1}\vec{x}, R^{-1}\vec{p}). \quad (6.33)$$

Kinetische Terme der Form  $\vec{p}^2 \rightarrow (R^{-1}\vec{p}) \cdot (R^{-1}\vec{p}) = \vec{p}^2$   
sind drehinvariant.

Potentiale sind drehinvariant, wenn sie

nur vom Betrag des Orts abhängen,  $r \equiv |\vec{x}|$

$$V(r) = V(|\vec{x}|) = V(|R^{-1}\vec{x}|), \quad (6.34)$$

d.h. Zentralpotential-Probleme haben Eigenfunktionen, die auch den Drehoperator diagonalisieren.

Bei  $N$  QM Teilchen sind z.B. Potentiale, die nur vom Teilchenabstand abhängen, drehinvariant,  $V = \sum_{i < j} V_{ij}(|x_i - x_j|)$ .

Das Coulomb-Potential ist genau in diesem Sinne drehinvariant.

### 6.3.2 Einteilchen Systeme & Drehimpulsalgebra

Im Folgenden betrachten wir Zentralpotentiale, die, wie oben diskutiert, drehinvariant sind.

D.h. wir beschränken uns auf Einteilchen-Hamilton-Operatoren der Form

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(r), \quad r = |\vec{x}|. \quad (6.35)$$

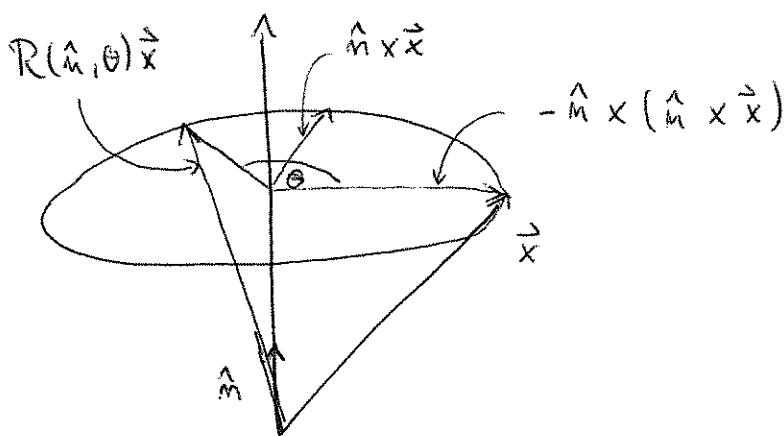
Weil  $\Gamma(R)$  unitär, lässt sich  $\Gamma(R)$  schreiben als

$$\Gamma(R) = e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{L}} \quad \text{mit } \mathcal{L}^\dagger = \mathcal{L} \quad (6.36)$$

hermitesch.

Für Drehinvariante Potentiale (6.35) kommutieren  $\Gamma(R)$  und  $\mathcal{L}$  mit  $H$ .  $\mathcal{L}$  ist also eine Konstante der Bewegung.

Wir betrachten zunächst einmal Drehungen um eine Achse  $\hat{n}$  (Einheitsvektor  $\hat{n} \cdot \hat{n} = 1$ ) um den Winkel  $\Theta$  im 3-dimensionalen Ortsraum:



Es gilt:

$$R(\hat{n}, \Theta)\vec{x} = (\hat{n} \cdot \vec{x})\hat{n} - \hat{n} \times (\hat{n} \times \vec{x}) \cos \Theta + \hat{n} \times \vec{x} \sin \Theta \quad (6.37)$$

oder infinitesimal

$$R(\hat{n}, \theta) \vec{x} = \vec{x} + \hat{n} \times \vec{x} \theta + \mathcal{O}(\theta^2), \quad (6.38)$$

d.h. 
$$\left. \frac{d}{d\theta} R(\hat{n}, \theta) \right|_{\theta=0} = \hat{n} \times \vec{x} =: \Omega_n \vec{x}$$

mit der reellen schiefsymmetrischen Matrix

$$\Omega_n = \begin{pmatrix} 0 & -n_3 & n_2 \\ n_3 & 0 & -n_1 \\ -n_2 & n_1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (6.39)$$

Welche Vektoren infinitesimal um die  $\hat{n}$ -Achse dreht. Da  $\hat{n}^2 = 1$ , folgt

$$\Omega_n^2 \vec{x} = \hat{n} \times (\hat{n} \times \vec{x}) = (\hat{n} \cdot \vec{x}) \hat{n} - \vec{x}$$

$$\Omega_n^3 \vec{x} = -\hat{n} \times \vec{x} = -\Omega_n \vec{x}, \quad (6.40)$$

d.h. alle geraden Potenzen von  $\Omega_n$  sind  $\sim \Omega_n^2$   
und alle ungeraden Potenzen sind  $\sim \Omega_n$ :

$$\Omega_n^{2n} = (-1)^{n+1} \Omega_n^2, \quad \Omega_n^{2n+1} = (-1)^n \Omega_n, \quad (6.41)$$

$n=1, 2, \dots$



Damit lässt sich  $e^{\Omega_m}$  leicht exponentieren:

$$\begin{aligned} e^{\theta \Omega_m} &= 1 + \Omega_m \left( \theta - \frac{\theta^3}{3!} + \dots \right) + \Omega_m^2 \left( \frac{\theta^2}{2!} - \frac{\theta^4}{4!} + \dots \right) \\ &= 1 + \Omega_m^2 - \Omega_m^2 \cos \theta + \Omega_m \sin \theta. \end{aligned} \quad (6.42)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow e^{\theta \Omega_m} \vec{x} &= (\hat{n} \cdot \vec{x}) \hat{n} - \hat{n} \times (\hat{n} \times \vec{x}) \cos \theta + \hat{n} \times \vec{x} \sin \theta \\ &\equiv R(\hat{n}, \theta) \vec{x}, \end{aligned} \quad (6.43)$$

d.h. wir haben eine Matrix-Identität für  $R(\hat{n}, \theta)$  gefunden

$$R(\hat{n}, \theta) = e^{\theta \Omega_m}. \quad (6.44)$$

$\Omega_m$  erzeugt also Drehungen um die Achse  $\hat{n}$ .

Analog suchen wir nun den hermiteschen

Operator  $L_m$ , der die Drehungen um  $\hat{n}$

im Zustandsraum der Quantenmechanik erzeugt,

$$\Gamma(R(\hat{n}, \theta)) = e^{-\frac{i}{\hbar} \theta L_m} \equiv e^{-\frac{i}{\hbar} \theta L_m}. \quad (6.45)$$

D.h. wir suchen  $L_m$ , so dass

$$\tilde{\Psi}(\vec{x}) = \Psi(e^{-\theta \Omega_m \vec{x}} \vec{x}') = \langle \vec{x}' | e^{-\frac{i}{\hbar} \theta L_m} | \Psi \rangle. \quad (6.46)$$

Entwickeln wir die linke Seite nach  $\theta$ ,

$$\begin{aligned} \Psi(e^{-\theta \Omega_m \vec{x}} \vec{x}') &= \Psi(\vec{x}') - \theta \Omega_m \vec{x} \cdot \vec{\nabla} \Psi(\vec{x}) \\ &\quad + \frac{\theta^2}{2} (\Omega_m \vec{x} \cdot \vec{\nabla})^2 \Psi(\vec{x}) + \dots \\ &= e^{-\theta (\Omega_m \vec{x}) \cdot \vec{\nabla}} \Psi(\vec{x}). \end{aligned} \quad (6.47)$$

Ein Vergleich mit (6.46) liefert uns die Ortsraumdarstellung von  $L_m$ :

$$\langle \vec{x}' | L_m = -i\hbar (\Omega_m \vec{x}) \cdot \vec{\nabla} \langle \vec{x}' | \quad ; \quad (6.48)$$

Mit Hilfe des Impulsoperators folgt die Operator-Identität:

$$L_m = (\vec{m} \times \vec{x}) \cdot \vec{p} = \hat{m} \cdot (\vec{x} \times \vec{p}). \quad (6.49)$$

Damit entspricht  $L_n$  der Projektion des Drehimpulsoperators auf die Drehachse,

$$L_n = \hat{n} \cdot \vec{L} \quad \text{mit} \quad \vec{L} = \vec{x} \times \vec{p}. \quad (6.50)$$

Die 3 Komponenten des Drehimpulsoperators

$$L_i = \epsilon_{ijk} x_j p_k \quad (6.51)$$

erzeugen also Drehungen um die Koordinatenachsen.

Die Hermitizität von  $\vec{L}$  lässt sich direkt nachprüfen,

$$\begin{aligned} L_i^\dagger &= (\epsilon_{ijk} x_j p_k)^\dagger = \epsilon_{ijk} p_k^\dagger x_j^\dagger = \epsilon_{ijk} p_k x_j \\ &= \epsilon_{ijk} (x_j p_k - \underbrace{[x_j, p_k]}_{= i\hbar \delta_{jk}}) = L_i - i\hbar \underbrace{\epsilon_{ijj}}_{=0} \sqrt{\quad} \end{aligned} \quad (6.52)$$

Mit Hilfe von (6.51) lässt sich die wichtige Drehimpulsalgebra ableiten. Wir beginnen mit den Vertauschungsregeln für  $L_i$  mit  $x_j$  und  $p_j$ :

$$\underline{[L_i, x_j]} = \epsilon_{ike} [x_k p_e, x_j] = \epsilon_{ike} x_k \underbrace{[p_e, x_j]}_{= -i\hbar \delta_{ej}} = \underline{i\hbar \epsilon_{ijk} x_k} \quad (6.53)$$

$$\underline{[L_i, p_j]} = \epsilon_{ike} [x_k p_e, p_j] = \epsilon_{ike} \underbrace{[x_k, p_j]}_{= i\hbar \delta_{kj}} p_e = \underline{i\hbar \epsilon_{ise} p_e}$$

Damit folgt für die Drehimpulsvertauschungsregeln

$$[L_i, L_j] = \epsilon_{jek} [L_i, x_k p_n] = \epsilon_{jek} (x_k [L_i, p_n] + [L_i, x_k] p_n)$$

$$= i\hbar \left( \epsilon_{jek} \epsilon_{ikm} x_k p_m + \underbrace{\epsilon_{jek} \epsilon_{iem} x_m p_k}_{\stackrel{\text{Lor}}{=} \epsilon_{jkl} \epsilon_{ikm} x_m p_l} \right)$$

$$= i\hbar \underbrace{\epsilon_{jek} \epsilon_{ikm}}_{=\delta_{jm} \delta_{ei} - \delta_{ji} \delta_{em}} (x_k p_m - x_m p_k)$$

$$= i\hbar (x_i p_j - x_j p_i) \quad (6.54)$$

Wegen

$$\begin{aligned} \epsilon_{ijk} L_k &= \epsilon_{isk} \epsilon_{kln} x_l p_m = (\delta_{ie} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{je}) x_k p_m \\ &= x_i p_j - x_j p_i \end{aligned} \quad (6.55)$$

folgt

$$\underline{[L_i, L_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} L_k} \quad (6.56)$$

Eine wichtige Folgerung aus (6.56) ist, dass die Komponenten des Drehimpulses jeweils zueinander inkompatible Observable sind. Zwar vertauscht jede einzelne Komponente mit  $H$ ,

aber nur eine Drehimpulskomponente kann gleichzeitig mit  $H$  diagonalisiert und somit scharf gemessen werden.

Sehr ähnliche Beobachtungen haben wir bereits beim Stern-Gerlach-Experiment gemacht. In der Tat gehorchen die Spin-Komponenten  $S_i$  ebenfalls der gleichen Algebra (6.56). Während  $S_i$  jedoch einen internen Freiheitsgrad (Spin) des Elektrons beschreibt, bezeichnet  $L_i$  den Bahndrehimpuls eines Teilchens (in einem Potential).

Sei  $\vec{V} \in \{\vec{x}, \vec{p}, \vec{L}\}$ . Aus den Vertauschungsregeln folgt

$$\begin{aligned} \Gamma(R) \vec{V} \Gamma^{-1}(R) &= e^{-\frac{i}{\hbar} \theta L_n} \vec{V} e^{\frac{i}{\hbar} \theta L_n} \\ &= \vec{V} - \frac{i}{\hbar} \theta [L_n, \vec{V}] + \mathcal{O}(\theta^2) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [\hat{n} \cdot \vec{L}, V_j] &= \vec{V} + \theta \hat{n} \times \vec{V} + \mathcal{O}(\theta^2) \\ &= m_i [L_i, V_j] \\ &= i \hbar m_i \varepsilon_{ijk} V_k \quad (6.38) \\ &= i \hbar \hat{n} \times \vec{V} \quad = \mathcal{R}(\hat{n}, \theta) \vec{V} \quad (6.57) \end{aligned}$$

(in der Tat gilt diese Beziehung nicht nur infinitesimal, sondern allgemein.)

(6.57) bedeutet, dass sich  $\vec{x}, \vec{p}$  und  $\vec{L}$  als Operatoren genau wie Vektoren im 3-dim Raum unter Drehungen transformieren. Man spricht daher auch von Vektoroperatoren.

Im Gegensatz dazu gilt für Zentralpotentiale

$$\Gamma(R) H \Gamma^{-1}(R) = H \tag{6.58}$$

oder  $\Gamma(R) (\vec{x} \cdot \vec{p}) \Gamma^{-1}(R) = (\vec{x} \cdot \vec{p})$ ,

d.h.  $[\vec{L}, H] = 0$  und  $[\vec{L}, \vec{x} \cdot \vec{p}] = 0$ . (6.59)

$H$  und  $(\vec{x} \cdot \vec{p})$  transformieren sich also wie Skalare unter Drehungen, heissen folglich skalare Operatoren.

### 6.3.3 Eigenwertproblem des Drehimpulses.

Mit dem Bahndrehimpuls  $\vec{L}$  und dem Stern-Gerlach-Spin  $\vec{S}$  haben wir bereits zwei Größen kennengelernt, die die Algebra (6.56) erfüllen. Allgemein bezeichnet man eine Größe  $\vec{J}$ , die

$$[\vec{J}_i, \vec{J}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} J_k, \quad J_i^\dagger = J_i \quad (6.70)$$

erfüllt, als Drehimpuls, unabhängig davon, welche konkrete Bedeutung oder welchen Ursprung sie hat (z.B. Bahndrehimpuls, Spin, gesamter Drehimpuls, Grand spin, etc.).

Im Folgenden wollen wir also versuchen, die Eigenwerte und Eigenfunktionen des Drehimpulses nun mit Hilfe von (6.70) zu konstruieren.

Konventionsbedingt wählt man zur Diagonalisierung  $J_3$  aus ( $J_1, J_2$  sind dann zwingend nicht-diagonal!). Im Folgenden sind die Lieferoperatoren

$$J_{\pm} = J_1 \pm iJ_2, \quad J_-^\dagger = J_+ \quad (6.71)$$

nützlich. Diese erfüllen die Vertauschungsrelationen

$$\begin{aligned} \underline{[J_3, J_{\pm}]} &= [J_3, J_1] \pm i [J_3, J_2] = i\hbar J_2 \pm \hbar J_1 \\ &= \underline{\pm \hbar J_{\pm}} \end{aligned}$$

$$\underline{[J_+, J_-]} = i [J_2, J_1] - i [J_1, J_2] = \underline{2\hbar J_3}$$

(6.72)

Wir beobachten, dass das Betragsquadrat des Drehimpulses mit allen  $J_i$  vertauscht,

$$\begin{aligned} \underline{[J^2, J_j]} &= [J_i J_i, J_j] = J_i [J_i, J_j] + [J_i, J_j] J_i \\ &= i\hbar \epsilon_{ijk} J_k + i\hbar \epsilon_{ijk} J_k \\ &= i\hbar \epsilon_{ijk} (\underbrace{J_i J_k + J_k J_i}_{\text{symmetrisch in } i, k}) = \underline{0}. \end{aligned} \quad (6.73)$$

Wir können also  $\underline{J^2}$  simultan mit  $J_3$  diagonalisieren.

Das Quadrat eines hermiteschen Operators ist nicht-negativ,

$$\begin{aligned} \langle \psi | \underline{J^2} | \psi \rangle &= \langle \psi | J_i J_i | \psi \rangle = (\langle \psi | J_i^\dagger) (J_i | \psi \rangle) \\ &\stackrel{|\phi\rangle := J_i |\psi\rangle}{=} \langle \phi | \phi \rangle \geq 0. \end{aligned} \quad (6.74)$$



Ist  $|4\rangle$  also Eigenfunktion von  $\vec{J}^2$  mit  
Eigenwert  $\lambda$ , so folgt

$$\langle 4 | \vec{J}^2 | 4 \rangle = \lambda \langle 4 | 4 \rangle \geq 0 \Rightarrow \lambda \geq 0. \quad (6.75)$$

Wir schreiben den nicht-negativen Eigenwert  $\lambda$  als

$$\lambda = \hbar^2 j(j+1), \quad j \geq 0 \quad (6.76)$$

mit zu bestimmendem  $j$ . Der Faktor  $\hbar^2$  ist so  
gewählt, dass  $j$  eine dimensionslose Zahl ist;  
dies ist die Drehimpulsquantenzahl.

Die zu bestimmenden Eigenwerte von  $J_3$   
bezeichnen wir mit  $\hbar j_3$ , wobei  $j_3$  wieder  
dimensionslos ist und magnetische Quantenzahl  
genannt wird (im SG-Experiment entspricht  
 $j_3 = S_z' = \pm \frac{\hbar}{2}$ ). Die normierten simultanen  
Eigenfunktionen von  $\vec{J}^2$  und  $J_3$  seien also

$$\begin{aligned} |j j_3\rangle : \quad \vec{J}^2 |j j_3\rangle &= \hbar^2 j(j+1) |j j_3\rangle, \\ J_3 |j j_3\rangle &= \hbar j_3 |j j_3\rangle. \end{aligned} \quad (6.77)$$

Im Folgenden benötigen wir

$$\begin{aligned} J_{\pm} J_{\mp} &= J_1^2 + J_2^2 \mp i (J_1 J_2 - J_2 J_1) \\ &= \overset{\rightarrow}{J}^2 - J_3^2 \pm \hbar J_3. \end{aligned} \quad (6.78)$$

Wegen  $J_-^+ = J_+$  gilt auch

$$\langle j j_3 | J_{\pm} J_{\mp} | j j_3 \rangle = \left( \langle j j_3 | J_{\mp}^+ \right) \left( J_{\mp} | j j_3 \rangle \right) \geq 0 \quad (6.79)$$

Mit (6.78) folgt:

$$\begin{aligned} 0 &\leq \langle j j_3 | J_{\pm} J_{\mp} | j j_3 \rangle = \langle j j_3 | \overset{\rightarrow}{J}^2 - J_3^2 \pm \hbar J_3 | j j_3 \rangle \\ &= \hbar^2 (j(j+1) - j_3^2 \pm j_3) \quad (6.79') \\ &= \hbar^2 \left( (j + \frac{1}{2})^2 - \frac{1}{4} - (j_3 \mp \frac{1}{2})^2 + \frac{1}{4} \right) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \left( j + \frac{1}{2} \right)^2 \geq \left( j_3 \mp \frac{1}{2} \right)^2 \quad (6.80)$$

Daraus folgt

$$\boxed{-j \leq j_3 \leq j}. \quad (6.81)$$

Mit ähnlichen Argumenten wie beim harmonischen Oszillator lassen sich die Eigenwerte  $j$  und  $j_3$  mit Hilfe der Leiteroperatoren bestimmen. Es gilt:

$$\begin{aligned}
 \underline{J_3} \underline{I_{\pm}} |j, j_3\rangle &= I_{\pm} (J_3 \pm \hbar) |j, j_3\rangle = \hbar I_{\pm} (j_3 \pm 1) |j, j_3\rangle \\
 &= \hbar (j_3 \pm 1) \underline{I_{\pm}} |j, j_3\rangle
 \end{aligned}
 \tag{6.82}$$

$I_{\pm} |j, j_3\rangle$  hat also den  $J_3$ -Eigenwert  $\hbar(j_3 \pm 1)$ . Einschließlich einer zu bestimmenden  $j$  und/oder  $j_3$ -abhängigen Normierungskonstanten  $C_{\pm}$  gilt die Zusammenhang

$$I_{\pm} |j, j_3\rangle = C_{\pm} |j, j_3 \pm 1\rangle. \tag{6.83}$$

$C_{\pm}$  sei so gewählt, dass die Zustände  $|j, j_3\rangle$  auf 1 normiert sind.

Wegen (6.79') gilt:

$$\begin{aligned}
 \langle j, j_3 | I_{\mp} I_{\pm} |j, j_3\rangle &\stackrel{(6.83)}{=} |C_{\pm}|^2 \underbrace{\langle j, j_3 \pm 1 | j, j_3 \pm 1\rangle}_{=1} \\
 &\stackrel{(6.79')}{=} \hbar^2 (j(j+1) - j_3^2 \mp j_3),
 \end{aligned}$$

woraus nach geeigneter Phasenwahl folgt, dass

$$J_{\pm} |j, j_3\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - j_3(j_3 \pm 1)} |j, j_3 \pm 1\rangle. \quad (6.84)$$

Ist  $\hbar j_3$  Eigenwert von  $J_3$ , so ist es auch  $\hbar(j_3 \pm 1)$ , es sei denn  $\sqrt{j(j+1) - j_3(j_3 \pm 1)} = 0$ , so dass (6.84) einen Nullvektor liefert.

Die wegen (6.81) ( $-j \leq j_3 \leq j$ ) einzig erlaubten Lösungen, für die die Wurzel verschwindet, ist

$$j_3 = j \quad \text{für} \quad \sqrt{j(j+1) - j_3(j_3+1)} \quad (6.85)$$

$$\text{und} \quad j_3 = -j \quad \text{für} \quad \sqrt{j(j+1) - j_3(j_3-1)}.$$

Damit (6.81) für alle durch (6.84) erzeugten Eigenwerte  $\hbar j_3$  erfüllt ist, muss das

"Abbruchkriterium" (6.85) eintreten (sonst könnte mit (6.84) ein beliebig großer oder kleiner Eigenwert  $\hbar j_3$  erzeugt werden).

Dies bedeutet, dass  $h_j$  und  $-h_j$  Eigenwerte von  $J_3$  sein müssen. Da nun die Differenz zweier Eigenwerte von  $J_3$  wegen (6.84) eine ganze Zahl sein muss, muss

$$j - (-j) = 2j \text{ ganzzahlig} \quad (6.86)$$

sein, d.h.

$$j = \text{ganz oder halbganz} \quad (6.87)$$

Da negative  $j$  keine neuen Eigenwerte von  $\vec{J}^2$ , nämlich  $h^2 j(j+1)$ , liefern, genügt es, sich auf nicht-negative  $j$  zu beschränken.

Für jedes  $j$  gibt es dann  $2j+1$  verschiedene Werte von  $J_3$ :

$$J_3 = -j, -j+1, \dots, j-1, j. \quad (6.88)$$

Der Eigenwert  $h^2 j(j+1)$  von  $\vec{J}^2$  ist also  $(2j+1)$ -fach entartet.

Da  $\vec{J}_3$  und  $\vec{J}^2$  hermitisch sind, bilden die Eigenvektoren ein Orthonormalsystem

$$\langle j_1 j_3 | j_1' j_3' \rangle = \delta_{j_1 j_1'} \delta_{j_3 j_3'} \quad (6.89)$$

Zusammenfassend ergibt sich folgendes Bild:

Im Zustand  $|j_1 j_3\rangle$  ist die Länge des Drehimpulsvektors  $= \hbar \sqrt{j(j+1)}$ , seine 3-Komponente ist  $= \hbar j_3$ .

Die transversalen Komponenten (im Betrag,  $\sqrt{J_1^2 + J_2^2} = \sqrt{J^2 - J_3^2}$ ) haben die Länge  $\hbar \sqrt{j(j+1) - j_3^2}$ ,

die Richtung der transversalen Komponente bleibt allerdings unbestimmt, da  $J_1, J_2$  mit  $J_3$  inkompatibel sind. Die Unsicherheit lässt sich leicht berechnen:

$$\begin{aligned} &\langle j_1 j_3 | (\Delta J_1)^2 | j_1 j_3 \rangle \langle j_1 j_3 | (\Delta J_2)^2 | j_1 j_3 \rangle \\ &\geq \frac{1}{4} | \langle j_1 j_3 | \underbrace{[J_1, J_2]}_{= i\hbar J_3} | j_1 j_3 \rangle |^2 = \left( \frac{\hbar j_3}{2} \right)^2 \end{aligned} \quad (6.90)$$

Wie angesprochen gilt diese Lösung des Drehimpuls-eigenwertproblems für viele Beispiele. Im Fall des Bahndrehimpulses  $\vec{J} \equiv \vec{L} = \vec{x} \times \vec{p}$  werden nur die ganzzahligen Eigenwerte realisiert, siehe unten. Im

Fall des Stern-Gerlach-Experiments gilt  $\vec{J} = \vec{S} \hat{=} \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$ ,  
 so dass  $j = \frac{1}{2}$ ,  $\vec{J}^2 = \vec{S}^2 \hat{=} \frac{3}{4} \hbar^2 \mathbb{1}$ , (6.91)

und  $\vec{J}_3 = \vec{S}_z \hat{=} \frac{\hbar}{2} \sigma_3$  mit  $j_3 = \pm \frac{1}{2}$ .

### 6.3.4 Kugelflächenfunktionen

Im Folgenden sollen die Eigenfunktionen des Bahndrehimpulses  $\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p}$  explizit im Ortsraum konstruiert werden. Dazu sind Kugelkoordinaten sehr nützlich,

$$\vec{x} = r \hat{x} = r \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \varphi \\ \sin \theta \sin \varphi \\ \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (6.92)$$

Die einzelnen Komponenten des Bahndrehimpulses in der Ortsraumdarstellung  $\hat{p} \hat{=} -i\hbar \vec{\nabla}$  lauten:

$$L_3 \hat{=} -i\hbar (x_1 \partial_2 - x_2 \partial_1) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$L_1 \hat{=} i\hbar \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \epsilon} + \cot \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (6.93)$$

$$L_2 \hat{=} i\hbar \left( -\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \epsilon} + \cot \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right),$$

wobei wir die Darstellung des Gradienten in Kugelkoordinaten verwendet haben (vgl. Übungen).

(NB: der Strich am Ortseigenwert  $\vec{x}'$  sei hier und im Folgenden weggelassen, da wir ausschließlich im Ortsraum arbeiten werden.)

Aus Konventionsgründen benennen wir die Eigenwerte  $j$  und  $j_3$  nun in  $l \hat{=} j$ ,  $m \hat{=} j_3$ .

Da die  $L_i$  nicht von  $r$  abhängen, sind die Eigenfunktionen ebenfalls unabhängig von  $r$



Wir nennen diese Eigenfunktionen "Kugelflächenfunktionen"

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) := \langle \hat{x} | l m \rangle. \quad (6.94)$$

Aus  $L_3 Y_{lm} = \hbar m Y_{lm}$  folgt, dass  $Y_{lm}$  geschrieben werden kann als

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = e^{im\varphi} P_{lm}(\theta), \quad (6.95)$$

d.h. die Kugelflächenfunktionen separieren in eine azimutale Phase und eine noch zu bestimmende Funktion  $P_{lm}(\theta)$ . Da  $(\theta, \varphi)$  und  $(\theta, \varphi + 2\pi)$  denselben Punkt auf der Kugeloberfläche bezeichnen, und da  $Y_{lm}(\theta, \varphi) \equiv Y_{lm}(\theta, \varphi + 2\pi)$  eindeutig sein muss, folgt die Ganzzahligkeit von  $m$  und damit auch von  $l$ .

Aus (6.93) und (6.71) folgt die explizite Ortsdarstellung des Leiteroperatoren

$$L_{\pm} = \hbar e^{\pm i\varphi} \left( \pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right). \quad (6.96)$$

Wir bestimmen zunächst  $Y_{\ell\ell}$ , d.h. für den Fall von maximalem  $m=\ell$ , da diese Eigenfunktion von  $L_+$  annihiliert werden muss (vgl. Argumentation  $a|0\rangle=0$  beim harmonischen Oszillator):

$$\begin{aligned} 0 &= L_+ Y_{\ell\ell}(\theta, \varphi) = \hbar e^{i\varphi} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) e^{i\ell\varphi} P_{\ell\ell}(\theta) \\ &= \hbar e^{i(\ell+1)\varphi} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} P_{\ell\ell}(\theta) - \ell \frac{\cos \theta}{\sin \theta} P_{\ell\ell}(\theta) \right) \end{aligned}$$

Lösung  $\Rightarrow Y_{\ell\ell}(\theta, \varphi) = c \cdot e^{i\ell\varphi} \sin^\ell(\theta), \quad (6.97)$

mit zu bestimmender Normierung  $c$ . Die Normierungsbedingung (6.89) lautet im Ortsraum

$$\begin{aligned} \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'} &= \langle \ell m | \ell' m' \rangle = \int_{\text{Maß für die Kugeloberfläche}} d\Omega \langle \ell m | \hat{x} \rangle \langle \hat{x} | \ell' m' \rangle \\ &= \int d\Omega Y_{\ell m}^*(\theta, \varphi) Y_{\ell' m'}(\theta, \varphi) \\ &= \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\varphi Y_{\ell m}^*(\theta, \varphi) Y_{\ell' m'}(\theta, \varphi) \quad (6.98) \end{aligned}$$

Für  $Y_{\ell\ell}$  führt dies auf

$$\begin{aligned}
 1 & \stackrel{(6.98)}{=} \int_0^\pi d\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} d\varphi |c|^2 \sin^{2\ell}(\theta) \\
 & = 2\pi |c|^2 \int_0^\pi d\theta \sin^{2\ell+1}(\theta) = 2\pi |c|^2 \frac{2}{2\ell+1} \frac{(2^\ell \ell!)^2}{(2\ell)!}
 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow Y_{\ell\ell}(\theta, \varphi) = \frac{(-1)^\ell}{2^\ell \ell!} \sqrt{\frac{(2\ell+1)}{4\pi} (2\ell)!} \sin^\ell \theta e^{i\ell\varphi}, \quad (6.99)$$

wobei wir aus Konventionsgründen den Phasenfaktor zu  $(-1)^\ell$  gewählt haben.

Alle weiteren Kugelflächenfunktionen folgen aus

(6.84):

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

$$\Rightarrow Y_{l, m-1}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{l(l+1) - m(m-1)}} e^{-i\varphi} (-\partial_\theta + i \cot\theta \partial_\varphi) Y_{l, m}(\theta, \varphi), \quad (6.100)$$

beginnend mit  $Y_{\ell\ell}(\theta, \varphi)$ . Ihre (semi-)explizite

Form lautet

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}} \frac{e^{im\varphi}}{\sin^m \theta} \left( \frac{d}{d\mu} \right)^{l-m} (1-\mu^2)^l \Big|_{\mu=\cos\theta} \quad (6.101)$$

z.B.

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{1,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{\pm i\varphi} \sin \theta$$

$$Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3\cos^2 \theta - 1), \quad Y_{2,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi},$$

$$Y_{2,\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi} \quad (6.102)$$

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines QM Teilchens, welches durch Kugelflächenfunktionen beschrieben wird (z.B. Wasserstoffatom), ist bezüglich des Winkels  $\sim |Y_{lm}|^2$ .

## Eigenschaften der Kugelflächenfunktionen

Bis auf eine Phase sind Kugelflächenfunktionen mit  $m$  und  $-m$  zueinander komplex konjugiert:

$$Y_{\ell, -m}(\theta, \varphi) = (-1)^m Y_{\ell m}^*(\theta, \varphi), \quad (6.103)$$

Für ein zentral-symmetrisches Potential vertauschen mit dem Hamilton-Operator nicht nur  $\vec{L}^2$  und  $L_3$  sondern auch der Paritätsoperator  $\Gamma(P)$ .

Die Kugelkoordinaten transformieren sich unter  $\vec{x} \rightarrow -\vec{x}$  gemäß

$$r \rightarrow r, \quad \theta \rightarrow \pi - \theta, \quad \varphi \rightarrow \varphi + \pi \quad (6.104)$$

$$\Rightarrow e^{im\varphi} \rightarrow (-1)^m e^{im\varphi}, \quad \sin\theta \rightarrow \sin\theta, \quad \cos\theta \rightarrow -\cos\theta$$

Dies bedeutet für die  $Y_{\ell m}$ 's:

$$\Gamma(P) Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = (-1)^{\ell} Y_{\ell m}(\theta, \varphi). \quad (6.105)$$

Zustände mit gerader Drehimpulsquantenzahl sind daher gerade unter Parität und umgekehrt.

Wegen Hermitizität von  $\hat{L}^2, L_3$  sind die  $Y_{lm}$  eine vollständige Orthonormalbasis auf der Kugeloberfläche. Jede (quadratintegrierbare) Funktion  $f(\theta, \varphi)$  auf der Kugeloberfläche kann daher geschrieben werden als

$$f(\theta, \varphi) = \sum_{l,m} \alpha_{lm} Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad \sum_{l,m} \equiv \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \quad (6.106)$$

bzw.  $\langle \hat{n} | f \rangle = \sum_{l,m} \underbrace{\langle \hat{n} | l m \rangle}_{Y_{lm}(\theta, \varphi)} \underbrace{\langle l m | f \rangle}_{\alpha_{lm}}$

Die Koeffizienten ergeben sich daher aus

$$\begin{aligned} \alpha_{lm} = \langle l m | f \rangle &= \int d\Omega \langle l m | \hat{n} \rangle \langle \hat{n} | f \rangle \\ &= \int d\Omega Y_{lm}^*(\theta, \varphi) f(\theta, \varphi). \end{aligned} \quad (6.107)$$

Die Vollständigkeit der Basis

$$\mathbb{1} = \sum_{l,m} |l m\rangle \langle l m| \quad (6.108)$$

läuft in Ortsdarstellung:

$$\langle \hat{n} | \mathbb{1} | \hat{n}' \rangle = \delta(\varphi - \varphi') \delta(\cos\theta - \cos\theta') = \sum_{l,m} \underbrace{Y_{lm}(\theta, \varphi)} \underbrace{Y_{lm}^*(\theta', \varphi')} \quad (6.109)$$

Zwei Eigenschaften geben wir noch ohne Beweis an ( $\overline{V_A}$ ):

Es gilt folgende Summenregel:

$$\sum_{m=-l}^l |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 = \frac{2l+1}{4\pi} \quad (6.110)$$

Die Greensche Funktion des Laplace-Operators lautet in Kugelkoordinaten:

$$\frac{1}{|\vec{x} - \vec{x}'|} = 4\pi \sum_{l,m} \frac{1}{2l+1} \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} Y_{lm}^*(\theta', \varphi') Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (6.111)$$

(wie bereits aus der Elektrostatik bekannt sein dürfte). Hier bezeichnet  $r_{<}$  ( $r_{>}$ ) den jeweils kleineren (größeren) Abstand  $r = |\vec{x}|$  oder  $r' = |\vec{x}'|$ .