

Beispiel. $H = -\Delta - \frac{e^2}{|x|}$ ist s.a.

$$V := -\frac{e^2}{r} = V_1 + V_2, \text{ wobei } V_1 = \chi(|x| \leq 1) V \text{ und } V_2 = (1 - \chi(|x| \leq 1)) V \in C^\infty$$

11 Drehimpuls

$L_1 = Q_2 P_3 - Q_3 P_2$, $L_2 = Q_3 P_1 - Q_1 P_3$, $L_3 = Q_1 P_2 - Q_2 P_1$
(keine Anordnungsprobleme, da alles kommutiert).

$$L^2 = L_1^2 + L_2^2 + L_3^2$$

Kommutationsrelationen:

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

$$[L^2, L_1] = [L^2, L_2] = [L^2, L_3] = 0$$

(in der Tat,

$$\begin{aligned} [L_1, L_2] &= [Q_2 P_3 - Q_3 P_2, Q_3 P_1 - Q_1 P_3] \\ &= Q_2 P_1 [P_3, Q_3] + Q_1 P_2 [Q_3, P_3] \\ &= i\hbar (Q_1 P_2 - Q_2 P_1) = i\hbar L_3 \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} [L^2, L_1] &= [L_1^2 + L_2^2 + L_3^2, L_1] = [L_1^2, L_1] + [L_2^2, L_1] + [L_3^2, L_1] \\ &= [L_1, L_1] L_1 + L_1 [L_1, L_1] + [L_2, L_1] L_2 + L_2 [L_2, L_1] + [L_3, L_1] L_3 + L_3 [L_3, L_1] \\ &= -i\hbar L_3 L_2 - i\hbar L_2 L_3 + i\hbar L_2 L_3 + i\hbar L_3 L_2 = 0 \end{aligned}$$

in der Koordinatendarstellung:

$$L_1 = i\hbar (x_3 \frac{\partial}{\partial x_2} - x_2 \frac{\partial}{\partial x_3})$$

$$L_2 = i\hbar (x_1 \frac{\partial}{\partial x_3} - x_3 \frac{\partial}{\partial x_1})$$

$$L_3 = i\hbar (x_2 \frac{\partial}{\partial x_1} - x_1 \frac{\partial}{\partial x_2})$$

Sie haben die Eigenschaft $L_i \psi(|x|) = 0$:

$$L_3 \psi(|x|^2) = i\hbar (x_2 \frac{\partial}{\partial x_1} - x_1 \frac{\partial}{\partial x_2}) \psi(x_1^2 x_2^2 x_3^2)$$

$$= i\hbar \psi' (x_2 \cdot 2x_1 - x_1 \cdot 2x_2) = 0.$$

Nützliche Formel:

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) - \frac{1}{\hbar^2 r^2} L^2$$

Überprüfen:

$$-\frac{1}{\hbar^2} L^2 = (x_3 \frac{\partial}{\partial x_2} - x_2 \frac{\partial}{\partial x_3})^2 + (x_1 \frac{\partial}{\partial x_3} - x_3 \frac{\partial}{\partial x_1})^2 + (x_2 \frac{\partial}{\partial x_1} - x_1 \frac{\partial}{\partial x_2})^2$$

$$= (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} \right) - x_1^2 \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - x_2^2 \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} - x_3^2 \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} \\ - 2x_1 x_2 \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_2} - 2x_2 x_3 \frac{\partial^2}{\partial x_2 \partial x_3} - 2x_3 x_1 \frac{\partial^2}{\partial x_3 \partial x_1}$$

Darüber,

$$r \frac{\partial}{\partial r} = x_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + x_2 \frac{\partial}{\partial x_2} + x_3 \frac{\partial}{\partial x_3}$$

$$\left(r \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 = x_1^2 \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + x_2^2 \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + x_3^2 \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} + 2x_1 x_2 \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_2} + 2x_2 x_3 \frac{\partial^2}{\partial x_2 \partial x_3} + 2x_3 x_1 \frac{\partial^2}{\partial x_3 \partial x_1} \\ + x_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + x_2 \frac{\partial}{\partial x_2} + x_3 \frac{\partial}{\partial x_3}$$

sodass

$$-\frac{1}{\hbar^2} L^2 = r^2 \Delta - \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 + r \frac{\partial}{\partial r} = r^2 \Delta - \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)$$

Darstellungstheorie von $SO(3)$

$SO(3) = \{ g \in \text{Mat}_{3 \times 3}(\mathbb{R}) : g^T g = I, \det g = 1 \}$
= die Gruppe der Drehungen von \mathbb{R}^3 um einen festen Punkt. Eine Lie-Gruppe, mit der Lie-Algebra

$$\mathfrak{so}(3) = \{ X \in \text{Mat}_{3 \times 3}(\mathbb{R}) : X^T + X = 0 \}$$

3-dimensionaler Vektorraum, mit der Basis

$$X_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad X_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad X_3 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

mit der Multiplikationstabelle

$$[X_1, X_2] = X_3, \quad [X_2, X_3] = X_1, \quad [X_3, X_1] = X_2$$

Wenn $x \in \mathbb{R}^3$, $x = (x_1, x_2, x_3)^T$, und

$$X(x) = x_1 X_1 + x_2 X_2 + x_3 X_3 = \begin{pmatrix} 0 & -x_3 & x_2 \\ x_3 & 0 & -x_1 \\ -x_2 & x_1 & 0 \end{pmatrix},$$

so gilt es

$$[X(x), X(y)] = X(xy)$$

Orthogonale Matrizen vs. Drehungen

$$e^{u_3 X_3} = \exp \begin{pmatrix} 0 & -u_3 & 0 \\ u_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{u_3^n X_3^n}{n!} =$$

$$= I + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k u_3^{2k}}{(2k)!} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k-1} u_3^{2k-1}}{(2k-1)!} X_3$$

$$= I + (\cos u_3 - 1) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \sin u_3 \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \cos u_3 & -\sin u_3 & 0 \\ \sin u_3 & \cos u_3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \text{Drehung um } u_3 \text{ um die } 3. \text{ Koordinatenachse}$$

$$X_3^2 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$X_3^3 = -X_3$$

$$X_3^4 = -X_3^2$$

$$X_3^5 = X_3$$

etc)

Behauptung: Drehung um die Achse mit Einheitsvektor $n = (n_1, n_2, n_3)$ um Winkel α ist gegeben durch

$$\exp(\alpha(n_1 x_1 + n_2 x_2 + n_3 x_3)) \quad (0 \leq \alpha \leq \pi) \quad \int_{S^2}$$

Vektoren $x \in \mathbb{R}^3$ mit $\|x\|=1$ und $0 \leq \alpha \leq \pi$ füllen eine Kugel mit den identifizierten antipodalen Punkten der Kugeloberfläche.

Beweis: Drehungen um n, α bezeichnen wir als $g(n, \alpha)$. Dann bilden die eine 1-parametrische Gruppe:

$$g(n, \beta) g(n, \alpha) = g(n, \alpha + \beta).$$

Ableitung $\frac{d}{d\beta} \Big|_{\beta=0}$:

$$(n_1 x_1 + n_2 x_2 + n_3 x_3) g(n, \alpha) = \frac{d}{d\alpha} g(n, \alpha).$$

Differentialgleichung mit $g(n, 0) = I$. Lösung:

$$g(n, \alpha) = \exp((n_1 x_1 + n_2 x_2 + n_3 x_3) \alpha).$$

VL 20, 13.01.2011

Wir konstruieren eine Darstellung R von $SO(3)$ auf $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$:

$$(R(g)\psi)(x) = \psi(g^{-1}x), \quad g \in SO(3), \psi \in \mathcal{H}.$$

Es ist klar, dass $R(I) = I$;

$$(R(g_1 g_2)\psi)(x) = \psi(g_2^{-1} g_1^{-1} x) =$$

$$= (R(g_1) R(g_2)\psi)(x) = (R(g_2)\psi)(g_1^{-1} x) = \psi(g_2^{-1} g_1^{-1} x)$$

Diese Darstellung ist auch unitär, d.h.,

$$R(g^{-1}) = R^{-1}(g) = R^*(g).$$

Um das zu überprüfen, merke: $R(g)$ sind Bijektionen von \mathcal{H} auf sich selbst, sodass es reicht zu zeigen:

$$\|R(g)\psi\| = \|\psi\|.$$

Dafür:

$$\|R(g)\psi\|^2 = \int_{\mathbb{R}^3} |\psi(g^{-1}x)|^2 dx \stackrel{\det g=1}{=} \int_{\mathbb{R}^3} |\psi(x)|^2 dx = \|\psi\|^2$$

Wir zeigen:

$$R(e^{u_1 x_1 + u_2 x_2 + u_3 x_3}) = e^{-\frac{i}{\hbar}(u_1 L_1 + u_2 L_2 + u_3 L_3)}$$

Zum Beispiel:

$$R(e^{u_3 x_3}) = e^{-\frac{i}{\hbar} u_3 L_3}, \text{ d.h.}$$

$$\psi(e^{-u_3 x_3} x) = e^{-\frac{i}{\hbar} u_3 L_3} \psi(x)$$

Beweis: die Funktion $\psi(x, u_3) = e^{-\frac{i}{\hbar} u_3 L_3} \psi(x)$
 $= e^{u_3 (x_2 \frac{\partial}{\partial x_1} - x_1 \frac{\partial}{\partial x_2})} \psi(x)$ genügt der Diffgl.

$$\frac{\partial \psi(x, u_3)}{\partial u_3} = -\frac{i}{\hbar} L_3 \psi(x, u_3) = (x_2 \frac{\partial}{\partial x_1} - x_1 \frac{\partial}{\partial x_2}) \psi(x, u_3)$$

Andererseits, die Funktion $\varphi(x, u_3) := \psi(e^{-u_3 L_3} x)$

$$= \psi \left(\begin{pmatrix} \cos u_3 & \sin u_3 & 0 \\ -\sin u_3 & \cos u_3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \right) =$$

$$= \psi(x_1 \cos u_3 + x_2 \sin u_3, -x_1 \sin u_3 + x_2 \cos u_3, x_3)$$

genügt derselben Gleichung:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial u_3} = \frac{\partial \psi}{\partial x_1} (-x_1 \sin u_3 + x_2 \cos u_3) + \frac{\partial \psi}{\partial x_2} (-x_1 \cos u_3 - x_2 \sin u_3)$$

$$= x_2 \left(\frac{\partial \psi}{\partial x_1} \cos u_3 - \frac{\partial \psi}{\partial x_2} \sin u_3 \right)$$

$$= x_1 \left(\frac{\partial \psi}{\partial x_1} \sin u_3 + \frac{\partial \psi}{\partial x_2} \cos u_3 \right)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial \psi}{\partial u_3} = \left(x_2 \frac{\partial}{\partial x_1} - x_1 \frac{\partial}{\partial x_2} \right) \psi(x, u_3)$$

Anfangswerte: $\psi(x, 0) = \psi(x, 0) = \psi(x)$. Daher:

$$\psi(x, u_3) = \psi(x, 0) \Leftrightarrow e^{-\frac{i}{\hbar} u_3 L_3} \psi(x) = \psi(e^{-u_3 X_3} x).$$

Analog:

$$\psi(e^{-u_2 X_2} x) = e^{-\frac{i}{\hbar} u_2 L_2} \psi(x)$$

$$\psi(e^{-u_3 X_3} x) = e^{-\frac{i}{\hbar} u_3 L_3} \psi(x)$$

Jetzt setze u_1, u_2, u_3 fest und betrachte die 1-parametrische Gruppe

$$U(t) = R(e^{t(u_1 X_1 + u_2 X_2 + u_3 X_3)})$$

von unitären Operatoren auf \mathcal{H} . Nach dem Satz von Stone

$$U(t) = e^{-itA}$$

mit der infinitesimalen Erzeugenden

$$A := i \frac{d}{dt} U(t) = \frac{1}{\hbar} (u_1 L_1 + u_2 L_2 + u_3 L_3)$$

Merke: wenn man Operatoren M_1, M_2, M_3 mit $[M_1, M_2] = M_3$, $[M_2, M_3] = M_1$, $[M_3, M_1] = M_2$ findet, so findet man eine Darstellung R von $SO(3)$, als

$$W(e^{u_1 X_1 + u_2 X_2 + u_3 X_3}) = \exp(u_1 M_1 + u_2 M_2 + u_3 M_3).$$

Man sagt, dass ein Operator A ~~sphärisch~~ kugelsymmetrisch ist, wenn er mit allen Operatoren $W(g)$ einer Darstellung von $SO(3)$ vertauschbar ist, d.h.

wenn $[A, L_i] = 0$, $i=1,2,3$. Merke: gibt es

kugelsymmetrische Operatoren $\neq cI$, so ist die

Darstellung reduzibel (\Leftrightarrow es gibt einen abgeschl.

Unterraum $\mathcal{H}_0 \subset \mathcal{H}$, der invariant unter allen $W(g)$ ist). (38)

Beispiele kugelsymmetrischer Operatoren:

▷ $f(r) = f(|x|)$ (Multiplikationsoperatoren)

($L_i f(r) \psi(x) = f(r) L_i \psi(x)$ wegen $L_i f(r) = 0$)

▷ L^2 (wegen $[L^2, L_i] = 0$)

▷ $T = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$ (offensichtlich in der Momentendarstellung, wo L_i haben dieselbe Form wie in der Koordinatendarstellung und $T = \frac{p^2}{2m}$ - Multiplikation durch Funktion von $|p|$ alleine).

▷ $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r)$

Sei $H\psi = E\psi$, $\psi = \psi_E$ zum EW E .

Dann

$$HW(g)\psi = W(g)H\psi = EW(g)\psi,$$

sodass $W(g)\psi$ auch ein EV zum EW E ist.

Also ist der Eigenraum \mathcal{H}_E zum EW E invariant unter $W(g)$. D.h., die Darstellung W von $SO(3)$

induziert eine Darstellung W_E von $SO(3)$ auf \mathcal{H}_E

Entweder ist W_E irreduzibel, oder enthält \mathcal{H}_E

$W(g)$ -invariante Unterräume, und dann wird

W_E zu der direkten Summe von irreduziblen

Darstellungen äquivalent. (kann man beweisen; entscheidend ist die unitäre Eigenschaft; die Räume der irreduziblen Darst. sind zueinander orthogonal).

Generisch ist der Fall, wo W_E irreduzibel sind;

man schreibt die Entartung der Darstellung W_E

den „zufälligen“ oder „versteckten“ Symmetrien zu ~~Wiederholung~~ (7)

Unser nächstes Ziel wird es sein, irreduzible Darstellungen von $SO(3)$ zu untersuchen.

Angenommen, gibt es eine irreduzible Darstellung auf einem n -dim Vektorraum E , es seien

$$-iJ_1, -iJ_2, -iJ_3$$

die infinitesimalen Erzeugenden davon, sodas

$$[J_1, J_2] = iJ_3, [J_2, J_3] = iJ_1, [J_3, J_1] = iJ_2.$$

Das Bild der Untergruppe der Drehungen um die 3. Koordinatenachse ist ebenfalls Abelsch.

Irreduzible Darstellungen davon (in die die E -Darstellung zerfällt) sind 1-dim von der

Form $e^{-im\alpha}$. In anderen Worten, man kann eine Basis in E wählen, in der die Matrix der Drehung um α_3 um α ist

$$e^{-iJ_3\alpha} = \begin{pmatrix} e^{-im_1\alpha} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & e^{-im_2\alpha} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & e^{-im_n\alpha} \end{pmatrix},$$

sodas

$$J_3 e_m = m e_m \quad (m = m_1, m_2, \dots, m_n)$$

Da die Darstellung irreduzibel ist und J^2

mit allem (J_1, J_2, J_3) vertauschbar ist, muß

J^2 als ein Skalaroperator wirken, d.h. alle

e_m Eigenvektoren von J^2 sind, zu ein von

demselben Eigenwert. Diesen Wert bezeichnen wir

durch $j(j+1)$:

$$J^2 e_m = j(j+1) e_m \quad (m = m_1, m_2, \dots, m_n)$$

Bezeichnung: $J_+ = J_1 + iJ_2$, $J_- = J_1 - iJ_2$, dann

$$[J^2, J_{\pm}] = 0 \quad (*)$$

$$[J_3, J_{\pm}] = \pm J_{\pm} \quad (**)$$

$$J^2 = J_{\pm} J_{\mp} + J_3^2 \mp J_3 \quad (***)$$

$$\begin{aligned} ((J_1 + iJ_2)(J_1 - iJ_2)) &= J_1^2 + J_2^2 - i[J_1, J_2] = \\ &= J_1^2 + J_2^2 + J_3 \end{aligned}$$

Da $(J_1^2 + J_2^2) e_m = (J^2 - J_3^2) e_m = (j(j+1) - m^2) e_m$,

und $((J_1^2 + J_2^2) e_m, e_m) \geq 0$, finden wir

$$|m| \leq \sqrt{j(j+1)}.$$

Wir zeigen weiter, dass aus jedem e_m kann man eine Kette von EV von J_3 zu den aufeinander folgenden EV $m', m'+1, m'+2, \dots, m''-1, m''$ (die Kette ist endlich wegen der letzten Abschätzung).

In der Tat,

$$J_3 J_{\pm} e_m = \pm J_{\pm} e_m + J_{\pm} J_3 e_m = (m \pm 1) J_{\pm} e_m.$$

Wir berechnen die Norm von $J_{\pm} e_m$:

$$\|J_{\pm} e_m\|^2 = (J_{\mp} J_{\pm} e_m, e_m) = ((J^2 - J_3^2 \mp J_3) e_m, e_m)$$

$$= j(j+1) - m(m \pm 1) = (j_{\mp} m)(j_{\pm} m + 1).$$

Es folgt:

$$J_{\pm} e_m = -\sqrt{(j_{\mp} m)(j_{\pm} m + 1)} e_{m \pm 1}$$

Da $J_- e_{m'} = 0$, $J_+ e_{m''} = 0$,

finden wir:

$$J_+ J_- e_{m'} = 0, \quad J_- J_+ e_{m''} = 0$$

$$\Leftrightarrow (J^2 - J_3^2 + J_3) e_{m'} = 0, \quad (J^2 - J_3^2 - J_3) e_{m''} = 0$$

$$\Leftrightarrow j(j+1) - m_+^2 + m_+ = 0, \quad j(j+1) - m_+^2 - m_+ = 0$$

$$\Rightarrow (m' + m'')(m' - m'' - 1) = 0. \quad \text{Da } m'' \geq m', \text{ gilt } m' = -m''. \text{ ferner, } j = m'', \text{ und}$$

$$m'' - m' = 2m'' \in \mathbb{N}_{\geq 0},$$

sodass

$$j = m'' \in \left\{ 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}, \dots \right\}$$

Also:

$$J^2 = j(j+1)I, \quad j \in \left\{ 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots \right\} = \frac{1}{2} \mathbb{N}_{\geq 0},$$

und für das gegebene j die möglichen Werte von m sind $(2j+1)$ Werte $m = -j, -(j-1), \dots, j-1, j$.

Da die Darstellung irreduzibel ist, ist

$$e_m, \quad m = -j, \dots, j$$

eine Basis von E , und $\dim E = 4 = 2j+1 = 4$

dieser Basis

VL 21, 18.01.2011

$$\left. \begin{aligned} J_+ f_m &= -\sqrt{(j-m)(j+m+1)} f_{m+1} \\ J_- f_m &= -\sqrt{(j-m-1)(j+m)} f_{m-1} \\ J_3 f_m &= m f_m \\ J^2 f_m &= j(j+1) f_m \end{aligned} \right\} m = -j, \dots, j$$

Das definiert die Darstellung D_j (j -der Darstellung index).

Gleichzeitig ist das der Weg zum Bestimmen von irreduziblen Komponenten einer jeden Darstellung: finde Vektoren e_{jj} mit $J_3 e_{jj} = j e_{jj}, J_+ e_{jj} = 0$

Zu jedem j finde f_{jm} , $m = -j, \dots, j-1$ laut

$$J_- f_{jm} = -\sqrt{(j+m)(j-m+1)} f_{j, m-1}.$$

Wir haben eine Darstellung R der $SO(3)$ auf $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$ mit

$$(R(g)\psi)(x) = \psi(S^{-1}x)$$

$$R(e^{i(u_1 L_1 + u_2 L_2 + u_3 L_3)}) = e^{-\frac{i}{\hbar}(u_1 L_1 + u_2 L_2 + u_3 L_3)}$$

Diese Operatoren wirken nur auf Winkelvariablen von $\psi(x_1, x_2, x_3)$, sodass es günstig ist, die Zerlegung

$$L^2(\mathbb{R}^3) = L^2(\mathbb{R}_{\geq 0}, r^2 dr) \otimes L^2(S^2, d\Omega)$$

zu betrachten, wobei $n = (\theta, \varphi)$ ein Punkt auf S^2 ist und $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$ das Flächenelement von S^2 . Auf dem ersten Faktor wirkt $SO(3)$ als J , auf dem zweiten als Drehungen. Wir müssen also die $SO(3)$ -invarianten Unterräume von $L^2(S^2, d\Omega)$ finden. Nach unserem Rezept soll man die Gleichungen

$$\frac{1}{\hbar} L_3 Y_{\ell m} = \ell Y_{\ell m}, \quad L_+ Y_{\ell m} = 0$$

lösen (für die Operatoren L bezeichnet man j als ℓ)
 In Kugelkoordinaten $x_1 = r \sin\theta \cos\varphi$, $x_2 = r \sin\theta \sin\varphi$, $x_3 = r \cos\theta$
 rechnet man:

$$\begin{cases} L_1 = i\hbar \left(\sin\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta \cos\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \\ L_2 = -i\hbar \left(\cos\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta \sin\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \\ L_3 = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi} \end{cases}$$

$$\Rightarrow L_+ = L_1 + iL_2 = e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i \cot\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right)$$

$$L_- = L_1 - iL_2 = e^{-i\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i \cot\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right)$$

NR

$$\begin{cases} L_1 = i\hbar \left(x_3 \frac{\partial}{\partial x_2} - x_2 \frac{\partial}{\partial x_3} \right) \\ L_2 = i\hbar \left(x_1 \frac{\partial}{\partial x_3} - x_3 \frac{\partial}{\partial x_1} \right) \\ L_3 = i\hbar \left(x_2 \frac{\partial}{\partial x_1} - x_1 \frac{\partial}{\partial x_2} \right) \end{cases}$$

$$\begin{cases} x_1 = r \sin \theta \cos \varphi \\ x_2 = r \sin \theta \sin \varphi \\ x_3 = r \cos \theta \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial r} &= \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial x_1} + \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial x_2} + \cos \theta \frac{\partial}{\partial x_3} \\ &= \frac{x_1}{r} \frac{\partial}{\partial x_1} + \frac{x_2}{r} \frac{\partial}{\partial x_2} + \frac{x_3}{r} \frac{\partial}{\partial x_3} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \varphi} &= -r \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial x_1} + r \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial x_2} \\ &= -x_2 \frac{\partial}{\partial x_1} + x_1 \frac{\partial}{\partial x_2} \Rightarrow \boxed{L_3 = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \theta} &= r \cos \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial x_1} + r \cos \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial x_2} - r \sin \theta \frac{\partial}{\partial x_3} \\ &= \cot \theta \left(x_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + x_2 \frac{\partial}{\partial x_2} \right) - \tan \theta x_3 \frac{\partial}{\partial x_3} \end{aligned}$$

$$\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cos \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} =$$

$$\begin{aligned} &= r \cos \theta \cos \varphi \sin \varphi \frac{\partial}{\partial x_1} + r \cos \theta \sin^2 \varphi \frac{\partial}{\partial x_2} - r \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial x_3} \\ &\quad - r \cos \theta \cos \varphi \sin \varphi \frac{\partial}{\partial x_1} + r \cos \theta \cos^2 \varphi \frac{\partial}{\partial x_2} \end{aligned}$$

$$= r \cos \theta \frac{\partial}{\partial x_2} - r \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial x_3} = x_3 \frac{\partial}{\partial x_2} - x_2 \frac{\partial}{\partial x_3}$$

$$\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cos \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$= r \cos \theta \cos^2 \varphi \frac{\partial}{\partial x_1} + r \cos \theta \cos \varphi \sin \varphi \frac{\partial}{\partial x_2} - r \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial x_3}$$

$$+ r \cos \theta \sin^2 \varphi \frac{\partial}{\partial x_1} - r \cos \theta \cos \varphi \sin \varphi \frac{\partial}{\partial x_2} = x_3 \frac{\partial}{\partial x_1} - x_1 \frac{\partial}{\partial x_3} \quad (104)$$

Daher lautet dies System

$$\frac{1}{i} L_3 Y_{\ell m} = \ell Y_{\ell m}, \quad L_+ Y_{\ell m} = 0$$

wie folgt:

$$-i \frac{\partial Y_{\ell m}}{\partial \varphi} = \ell Y_{\ell m}, \quad \frac{\partial Y_{\ell m}}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial Y_{\ell m}}{\partial \varphi} = 0$$

Erste Gleichung gibt

$$Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = e^{i\ell\varphi} F_{\ell m}(\theta) \quad \ell = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{also } \ell \in \mathbb{Z}_{\geq 0})$$

Zweite:

(für $\ell \in \{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots\}$ die Darstellung von $SO(3)$ kann nicht in einer Darstellung von $SO(3)$ integriert werden, sondern nur in einer von $SU(2)$)

$$\frac{\partial Y_{\ell m}}{\partial \theta} - \ell \cot \theta Y_{\ell m} = 0 \iff \frac{dF_{\ell m}(\theta)}{d\theta} - \ell \cot \theta F_{\ell m}(\theta) = 0$$

Lösung: $\frac{dF_{\ell m}(\theta)}{F_{\ell m}(\theta)} = \frac{\ell d \sin \theta}{\sin \theta} \Rightarrow F_{\ell m}(\theta) = c (\sin \theta)^\ell$, sodp

$$Y_{\ell m}(\theta, \varphi) = c \sin^\ell \theta e^{i\ell\varphi}$$

Und weiter:

$$Y_{\ell, m-1} = -\frac{1}{\sqrt{(2\ell m)(2\ell m+1)}} L_- Y_{\ell, m}$$

$$= -\frac{1}{\sqrt{(2\ell m)(2\ell m+1)}} e^{-i\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) Y_{\ell, m}$$

Beispiel:

$$Y_{\ell, \ell-1} = -\frac{1}{\sqrt{(2\ell+1) \cdot 2}} e^{-i\varphi} c \left(-\ell \sin^{\ell-1} \theta \cos \theta e^{i\ell\varphi} + i \frac{\cos \theta}{\sin \theta} \sin^\ell \theta \cdot i\ell e^{i\ell\varphi} \right)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2\ell+1}} c \frac{2\ell}{\sqrt{2(2\ell+1)}} e^{i(\ell-1)\varphi} \cos \theta \sin^{\ell-1} \theta$$

Man kann zeigen

$$Y_{\ell m} = (-1)^m \sqrt{\frac{(2\ell)!}{(2\ell-2m)!}} \frac{1}{2^{\ell+1}} e^{im\varphi} (1-\mu^2)^{-\frac{m}{2}} \frac{d^m}{d\mu^m} (1-\mu^2)^\ell$$

- sog. Kugelfunktionen der Ordnung ℓ .

$$L^2(S^2, du) = \bigoplus_{l=0}^{\infty} D_l,$$

D_l - ein Unterraum von $\dim 2l+1$ (ungerade) und einer Basis $Y_{lm}(u)$, $m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$.

Der Satz über die Zerlegung der Darstellung von $SO(3)$ in die direkte Summe irreduzibler Darstellungen entspricht der Behauptung über die Vollständigkeit des Systems von Kugelfunktionen in $L^2(S^2, du)$.

Der S.S. Operator L^2 auf $L^2(S^2, du)$ hat das reelle Punktspektrum $\hbar^2 l(l+1)$ (von Vielfachheit je $2l+1$, $l = 0, 1, 2, \dots$).

Teilchen in einem zentralen Kraftfeld

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(r) \quad \text{ist kugelsymmetrisch.}$$

In Kugelkoordinaten lautet die Schrödingergleichung:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \psi + \frac{L^2}{2\mu r^2} \psi + V(r) \psi = E \psi$$

Ansatz:

$$\psi(r, u) = R_l(r) Y_{lm}(u) -$$

Eigenfunktionen, die den folgenden Gl. genügen:

$$L_3 \psi = m \psi, \quad L^2 \psi = \hbar^2 l(l+1) \psi, \quad m = -l, \dots, l.$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR_l}{dr} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} R_l + V(r) R_l = E R_l$$

Setzt man $R_l = \frac{f_l}{r}$, so erhält man

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d(f_l/r)}{dr} \right) = -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{d}{dr} \left(r \frac{df_l}{dr} - f_l \right) = -\frac{\hbar^2}{2\mu r} \frac{df_l}{dr} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \frac{f_l}{r} + V(r) \frac{f_l}{r} = E \frac{f_l}{r} \right)$$

Also:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 f_\ell}{dr^2} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2} f_\ell + V(r) f_\ell = E f_\ell.$$

- die radiale Schrödinger-Gleichung. Hängt nicht von m (der x_3 -Projektion der Drehmomentum) ab. Dafür hat man für jedes $\ell=0,1,2,\dots$ seine eigene radiale Schr.-Gl.

Sie hat dieselbe Form wie die gewöhnliche Schr.-Gl.

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 f}{dr^2} + V_{\text{eff}}(r) f = E f$$

mit

$$V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2},$$

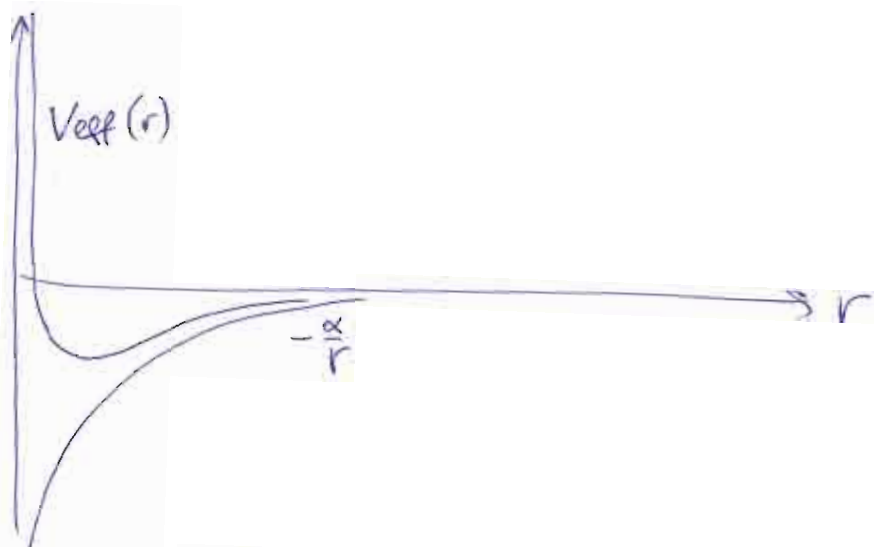
allerdings gilt sie nur für $r > 0$ - auf der positiven Halbachse. Es ist klar, dass wir nach f_ℓ mit $f_\ell(0) = 0$ suchen. Per Konstruktion ist unser radialer Schr.-Operator

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + V_{\text{eff}}(r) \quad \text{mit Randbed. } f_\ell(0) = 0$$

selbstadjungiert, ~~was~~ $m \in L^2(\mathbb{R}_{>0})$ sobald $H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(r)$ in $L^2(\mathbb{R}^3)$ selbstadjungiert ist. Man kann zeigen, dass das Spektrum der radialen Schr.-Gl. zu einer gegebenen ℓ immer einfach ist, daher kann man eine zufällige Entartung des Spektrums nur haben, wenn zwei radiale Schr.-Gl. zu ℓ_1 und ℓ_2 gleiche Eigenwerte besitzen.

Der Term $\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2}$ heißt das zentrifugale Potential (ist immer positiv, sodass die entsprechende Kraft abstoßend ist). Für ein anziehendes Coulomb Potential $-\frac{\alpha}{r}$ ($\alpha > 0$) ist für $r \rightarrow 0$ das

Zentrifugale Potential dominierend:



für weit asymptotischem Verhalten von $V(r)$ für $r \rightarrow \infty$ unterscheidet man zwischen

▷ Nahwechsellwirkung:

$$V(r) = O\left(\frac{1}{r^{2+\epsilon}}\right) \text{ oder } \int_0^{\infty} r |V(r)| < \infty$$

Das Spektrum $\{E > 0\}$ ist abs. stetig und einfach, während für $\{E < 0\}$ gibt es endlich viele Eigenwerte.

Heuristisch: für $r \rightarrow \infty$ kann man den Term $\frac{l(l+1)}{r^2} + V(r)$ vernachlässigen:

$$-\frac{1}{2\mu} f_e'' = E f_e;$$

für $E > 0$ hat man zwei beschränkte Lösungen

$f_e^{\pm}(r) = e^{\pm ikr} (1 + o(1))$, $k = \sqrt{2\mu E}$; für $E < 0$ zwei Lösungen $f_e^{\pm}(r) = e^{\pm \alpha r} (1 + o(1))$ mit $\alpha^2 = -2\mu E > 0$, $\alpha > 0$, nur eine davon beschränkt.

für $r \rightarrow 0$ ist der Term $\frac{l(l+1)}{r^2}$ singulärer denn $V(r)$; man betrachtet

$$f_e'' - \frac{l(l+1)}{r^2} f_e = 0,$$

mit zwei lin. unabh. Lösungen r^{-l} und r^{l+1} , und uns interessiert die Lösung mit $f_e(r) \sim r^{l+1}$ für $r \rightarrow 0$. Das bestimmt die Lösung, bis auf

einen Faktor. Für $E < 0$ soll sie sich verhalten wie $e^{-\alpha r} \rightarrow$ algebraische Gleichung \rightarrow diskretes Spektrum.

Für $E > 0$ alle Lösungen sind beschränkt \rightarrow kontinuierliches Spektrum.

12) Das Wasserstoffatom

$$V(r) = -\frac{\alpha}{r}, \quad \alpha = e^2.$$

Einheiten: $\hbar = 1, \mu = 1, \alpha = 1$

$$f_e'' + \left(\frac{2}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2E}{r} \right) f_e = 0$$

Diskretes Spektrum $E = -\alpha^2/2 < 0$

Suchen nach Lösungen mit

$$f_e(r) \sim \begin{cases} e^{-\alpha r}, & r \rightarrow +\infty \\ r^{l+1}, & r \rightarrow 0+ \end{cases}$$

in der Form

$$f_e(r) = r^{l+1} e^{-\alpha r} \Lambda_l(r)$$

Einsetzen:

$$\begin{aligned} f_e''(r) &= \left((l+1)r^l e^{-\alpha r} \Lambda_l(r) - \alpha r^{l+1} e^{-\alpha r} \Lambda_l(r) + r^{l+1} e^{-\alpha r} \Lambda_l'(r) \right)' \\ &= (l+1)l r^{l-1} e^{-\alpha r} \Lambda_l(r) - 2\alpha(l+1)r^l e^{-\alpha r} \Lambda_l(r) + 2(l+1)r^l e^{-\alpha r} \Lambda_l'(r) \\ &\quad + \alpha^2 r^{l+1} e^{-\alpha r} \Lambda_l(r) - 2\alpha r^{l+1} e^{-\alpha r} \Lambda_l'(r) + r^{l+1} e^{-\alpha r} \Lambda_l''(r) \end{aligned}$$

\leadsto

$$\begin{aligned} \frac{l(l+1)}{r^2} f_e + \alpha^2 f_e - \frac{2\alpha(l+1)}{r} f_e - 2\alpha(l+1)r^l e^{-\alpha r} \Lambda_l \\ + 2(l+1)r^l e^{-\alpha r} \Lambda_l' - 2\alpha r^{l+1} e^{-\alpha r} \Lambda_l' + r^{l+1} e^{-\alpha r} \Lambda_l'' \\ + 2r^l e^{-\alpha r} \Lambda_l = \frac{l(l+1)}{r^2} f_e - \alpha^2 f_e = 0 \end{aligned}$$