Jörg Wassenberg

Die Ganzzahligkeit des Bahndrehimpulses

hauptsächlich Vorstellung des Artikels

„Bemerkungen zur Quantentheorie des Bahndrehimpulses“

von Cornelius Noack

Cornelius C. Noack

Universität Bremen
Fachbereich 1 - Physik
28334 Bremen

Bemerkungen zur Quantentheorie des Bahndrehimpulses, Physikalische Blätter **41,Nr.8** 283-285 (1985)

http://www.itp.uni-bremen.de/~noack/orb-ang.ps

Klassisch wie quantenmechanisch stellt der Drehimpuls $\mathbf{L}$ eine wichtige Größe in der Physik dar.

Bei der Bewegung eines Massenpunktes im Zentralpotential $V(r)$ ist er eine Erhaltungsgröße,

$$\frac{d}{dt}\mathbf{L} = 0 \quad \text{bzw.} \quad [\mathbf{L}, H] = 0.$$

Der Drehimpuls erzeugt über den unitären Operator

$$U(\boldsymbol{\phi}) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{\phi} \cdot \mathbf{L}\right) \quad , \quad \boldsymbol{\phi} = \phi\hat{\mathbf{n}}$$

Drehungen $\psi(\mathbf{x}') = U(\boldsymbol{\phi})\psi(\mathbf{x})$ um die $\hat{\mathbf{n}}$-Achse um den Winkel ϕ.

Der Formalismus der Quantenmechanik läßt sich am Drehimpuls sehr schön demonstrieren.

Definition des Drehimpulses (klassisch):

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times m\mathbf{v}$$

Quantenmechanik: Ersetze Ort und Impuls durch Operatoren,

$$\mathbf{r} \to \mathbf{q} \quad , \quad m\mathbf{v} \to \mathbf{p},$$

welche die Born-Jordansche Vertauschungsrelation

$$[q_j, p_k] = i\hbar\delta_{jk}\mathbf{1} \tag{1}$$

befolgen. Dann ist

$$\mathbf{L} = \mathbf{q} \times \mathbf{p}, \tag{2}$$

bzw. in Komponenten

$$L_j = \epsilon_{jkl} q_k p_l.$$

Aus (1) und (2) folgen die Vertauschungsrelationen des Drehimpulses

$$[L_j, L_k] = i\hbar\epsilon_{jkm} L_m. \tag{3}$$

Verallgemeinerung: Jeder selbstadjungierte Operator $\mathbf{L}$, der (3) erfüllt, wird als Drehimpuls bezeichnet, $\mathbf{q} \times \mathbf{p}$ zur Unterscheidung *Bahndrehimpuls* genannt.

Wegen

$$[\mathbf{L}^2, L_z] = 0$$

gibt es gemeinsame Eigenzustände $|l, m\rangle$ zu $\mathbf{L}^2$ und L_z, welche die Eigenwertgleichungen

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^2 \, |l, m\rangle &= \hbar^2 l(l+1) \, |l, m\rangle \,, & (4) \\ L_z \, |l, m\rangle &= \hbar m \, |l, m\rangle & (5) \end{aligned}$$

erfüllen. Man findet $2l \in \mathbf{N}^0$, $|m| \leq l$, $l - m \in \mathbf{N}^0$.

Experiment: Der Bahndrehimpuls besitzt nur ganzzahlige Eigenwerte $l \in \mathbf{N}^0$.

Warum?

<u>Standardlehrbuchantwort auf diese Frage</u>

In Ortsdarstellung gilt

$$\mathbf{q} \to \mathbf{r} \quad , \quad \mathbf{p} \to \frac{\hbar}{i}\nabla. \tag{6}$$

In Polarkoordinaten (r, ϑ, φ) ist

$$L_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}. \tag{7}$$

r-unabhängiger Teil der Eigenfunktionen in Ortsdarstellung: $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$

Eigenwertgleichung (5) für L_z,

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}Y_{lm}(\vartheta,\varphi)=\hbar m Y_{lm}(\vartheta,\varphi),$$

besitzt die Lösung

$$Y_{lm}(\vartheta,\varphi)=e^{im\varphi}\Theta(\vartheta).$$

Eindeutigkeit der Wellenfunktion verlangt $Y_{lm}(\vartheta,\varphi+2\pi)=Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$. Es folgt

$$e^{im(2\pi+\varphi)}=e^{im\varphi}\Rightarrow e^{im2\pi}=1.$$

Diese Gleichung ist nur für $m\in\mathbf{Z}$ erfüllt.

$\square$

Dieser Beweis findet sich in fast allen Lehrbüchern, beispielsweise

Haken u. Wolf, Jelitto, Messiah, Rae

Nolting, Scheck, Schwabl

Problem: Die Wellenfunktion muß nicht eindeutig sein, sondern nur ihr Betrag.
(Pauli, Handbuch d. Phys. Bd XXIV, Berlin 1933)

Für halbzahliges m ist $e^{im2\pi} = -1$ und

$$|Y_{lm}(\vartheta, \varphi + 2\pi)| = |Y_{lm}(\vartheta, \varphi)| \,.$$

Halbzahliges m wäre demnach erlaubt.

Alternative Beweise:

- Pauli, Helv. Phys. Acta **12** (1939), 147
- Buchdahl, Am. J. Phys. **30** (1962), 829
- Lèvy-Leblond, Am. J. Phys. **35** (1967), 444
- van Winter, Ann. Phys. (NY) **47** (1968), 232

Erste Äußerung zu diesem Thema:

Born u. Jordan, Elementare Quantenmechanik, Berlin 1930

Wie kann die Ganzzahligkeit des Bahndrehimpulses bewiesen werden?

Vertauschungsrelationen (3) allein reichen nicht aus, denn es gibt Drehimpulse mit halbzahligen Eigenwerten (Spin).

Der Bahndrehimpuls muß eine Eigenschaft besitzen, die ihn vor halbzahligen Drehimpulsen auszeichnet. Eine solche ist seine Definition (2):

$$\mathbf{L} = \mathbf{q} \times \mathbf{p}$$

Sie bewirkt unter anderem

$$\begin{aligned} \mathbf{q} \cdot \mathbf{L} &= 0, \\ \mathbf{p} \cdot \mathbf{L} &= 0. \end{aligned}$$

Kurzfassung des auf Born und Jordan zurückgehenden Beweises

Idee: Es genügt zu zeigen, daß aus der Existenz einer Lösung $|l, m\rangle$ von (4) und (5) zum Eigenwert $l > 0$ die Existenz einer Lösung zum Eigenwert $l - 1$ folgt.

Dann folgt nämlich aus Existenz einer Lösung mit halbzahligem l die Existenz einer Lösung mit $l = -\frac{1}{2}$ im Widerspruch zu $l \geq 0$.

Beweis:

Sei $\mathbf{K}$ ein beliebiger Vektoroperator mit vertauschenden Komponenten, d.h.

$$\begin{aligned} [L_j, K_k] &= i\hbar\epsilon_{jkm}K_m, \\ [K_j, K_k] &= 0. \end{aligned}$$

Definiere einen Operator

$$\mathbf{A}^n := i\mathbf{K} \times \mathbf{L} - \hbar n\mathbf{K}.$$

Wie üblich ist $V_\pm := V_x \pm iV_y$ für $\mathbf{V} \in \{\mathbf{A}^n, \mathbf{K}, \mathbf{L}\}$.

Die Komponenten von $\mathbf{A}^n$ lauten

$$
\begin{aligned}
A_+^n &= -K_z L_+ + K_+(L_z - \hbar n), \\
A_-^n &= K_z L_- - K_-(L_z + \hbar n), \\
A_z^n &= K_- L_+ + K_z(L_z - \hbar n) - \mathbf{K} \cdot \mathbf{L}.
\end{aligned}
$$

Man findet die Kommutatoren

$$
\begin{aligned}
[A_+^n, A_-^n] &= 2\hbar \mathbf{K}^2 L_z, \\
[L_+, A_-^n] &= 2\hbar A_z^n, && (8) \\
[L_z, A_-^n] &= -\hbar A_-^n. && (9)
\end{aligned}
$$

Nun sei $|n, n\rangle$ Eigenvektor von $\mathbf{L}^2$ und L_z mit Eigenwerten $l = m = n$. Dann ist

$$
\begin{aligned}
A_+^n |n, n\rangle &= 0, \\
A_z^n |n, n\rangle &= -\mathbf{K} \cdot \mathbf{L} |n, n\rangle, && (10) \\
A_+^n A_-^n |n, n\rangle &= \left([A_+^n, A_-^n] + A_-^n A_+^n\right) |n, n\rangle \\
&= 2\hbar^2 n \mathbf{K}^2 |n, n\rangle. && (11)
\end{aligned}
$$

Definiere $|\psi\rangle := A_-^n |n,n\rangle$.

Dann folgt aus (11) für $n > 0$

$$\mathbf{K}^2 |n,n\rangle \neq 0 \Rightarrow |\psi\rangle \neq 0.$$

Wirkung von L_z auf $|\psi\rangle$:

$$\begin{aligned} L_z |\psi\rangle &= \Big([L_z, A_-^n] + A_-^n L_z\Big) |n,n\rangle \\ &\overset{(9)}{=} \hbar(n-1) |\psi\rangle \end{aligned}$$

Also ist $|\psi\rangle$ Eigenzustand von L_z zum Eigenwert $m = n - 1$.

Wirkung von L_+ auf $|\psi\rangle$:

$$\begin{aligned} L_+ |\psi\rangle &= \Big([L_+, A_-^n] + A_-^n L_+\Big) |n,n\rangle \\ &\overset{(8)}{=} 2\hbar A_z^n |n,n\rangle \overset{(10)}{=} -2\hbar \mathbf{K}\cdot\mathbf{L} |n,n\rangle \end{aligned}$$

Dies besagt, daß $n-1$ der maximale Eigenwert von L_z ist, $n-1 = l$, sofern nur $\mathbf{K}\cdot\mathbf{L}\,|n,n\rangle = 0$ ist.

Damit folgt der <u>Satz</u>:

Gibt es einen Vektoroperator $\mathbf{K}$ mit vertauschenden Komponenten, für den

$$\mathbf{K}^2 \, |l, l\rangle \neq 0 \text{ für alle } l > 0$$

und

$$\mathbf{K} \cdot \mathbf{L} = 0$$

gilt, so sind alle Drehimpulseigenwerte ganzzahlig.

Diese Forderungen werden durch $\mathbf{K} = \mathbf{p}$ erfüllt, da $\mathbf{p}^2$ nicht von ϑ und φ abhängt und somit auf $|l, l\rangle$ rein multiplikativ wirkt.

$\square$

Mögliche Kritikpunkte:

1. $|\psi\rangle$ ist Eigenzustand zu L_z und wird von L_+ vernichtet. Die Bezeichnung „Drehimpulseigenzustand“ ist nur dann gerechtfertigt, wenn $|\psi\rangle$ auch Eigenzustand zu $\mathbf{L}^2$ ist. Ist dies erfüllt?

2. Ist die Behauptung, $\mathbf{p}^2$ hänge nicht von ϑ und φ ab, wirklich so trivial?

Noch ein Beweis:

Definiere Leiteroperatoren a_j, ${a_j}^\dagger$ analog zum Harmonischen Oszillator,

$$a_j := \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\, q_j + \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\, p_j \quad , \quad j \in \{1,2,3\}.$$

Bilde daraus

$$a_+ := \frac{a_1 + ia_2}{\sqrt{2}} \quad , \quad a_- := \frac{a_1 - ia_2}{\sqrt{2}}.$$

Es folgt

$$\begin{aligned} L_z &= q_1 p_2 - q_2 p_1 = \frac{\hbar}{i}\left({a_1}^\dagger a_2 - a_1 {a_2}^\dagger\right) \\ &= \hbar\Big(\underbrace{{a_-}^\dagger a_-}_{=:N_-} - \underbrace{{a_+}^\dagger a_+}_{=:N_+}\Big). \end{aligned}$$

Weiter ist

$$[a_\pm, {a_\pm}^\dagger] = 1,$$

woraus wie beim Harmonischen Oszillator folgt, daß die Eigenwerte von $N_\pm$ aus $\mathbf{N}^0$ sind, also auch deren Differenz. Somit sind auch m und l ganzzahlig.

$\square$

Beobachtung: In Ortsdarstellung und Polarkoordinaten werden $\mathbf{L}^2$, L_z zu Differentialoperatoren, die Eigenwertgleichungen (4), (5) somit zu Differentialgleichungen. Diese besitzen Lösungen Y_{lm} *für alle* $l \in \mathbf{R}^{0+}$.

Im abstrakten Formalismus ist die Halbzahligkeit der Drehimpulseigenwerte eine Folge der Drehimpulsvertauschungsrelation (3), welche wiederum eine direkte Konsequenz der fundamentalen Vertauschungsrelation (1) ist.

Andererseits wird die Form der Eigenwertgleichungen in Ortsdarstellung durch die Ersetzungsvorschrift (6) bestimmt. Diese soll aber gerade die Gültigkeit der Born-Jordanschen Vertauschungsrelation sicherstellen.

Warum haben dann die Eigenwertgleichungen in Ortsdarstellung nicht-halbzahlige Lösungen, wenn dies doch durch die Vertauschungsrelationen verboten wird?

Feststellung: q_j und p_j sind *unbeschränkte* Operatoren im Hilbertraum.

Definition: (Beschränkter Operator)
Seien $\mathcal{H}_1$, $\mathcal{H}_2$ normierte Räume. Ein Operator A: $\mathcal{H}_1 \supseteq D_A \to \mathcal{H}_2$ heißt beschränkt, wenn es ein $c \in \mathbf{R}$ gibt, so daß

$$\|Af\| \leq c\|f\| \text{ für alle } f \in D_A.$$

Das kleinste derartige c heißt *Norm* von A,

$$\|A\| := \sup_{f \in D_A} \frac{\|Af\|}{\|f\|}.$$

Da die obengenannten Operatoren beliebig große Eigenwerte besitzen, sind sie unbeschränkt.

<u>Satz</u>: Ein auf einem Banachraum $\mathcal{H}$ wirkender, überall definierter linearer Operator A ist beschränkt, falls eine der folgenden Voraussetzungen erfüllt ist:

- A ist abgeschlossen.
- $\dim \mathcal{H} < \infty$
- Es gibt einen überall definierten zu A adjungierten Operator.
- A ist selbstadjungiert.
- ...

Kann man diesen Satz anschaulich verstehen?

Als Beispiel betrachte man den anschaulichen Hilbertraum $\mathcal{L}_2^a$ der quadratintegrablen Funktionen f: $(0, a) \to \mathbf{C}$ mit

$$\|f\| = \sqrt{\int_0^a dx\, |f(x)|^2} < \infty.$$

Der lineare Operator A: $\mathcal{L}_2^a \supseteq D_A \to \mathcal{L}_2^a$, $Af(x) := xf(x)$ ist <u>beschränkt</u>,

$$\|Af\| = \sqrt{\int_0^a dx\, x^2 |f(x)|^2} \le a\|f\|,$$

mit $\|A\| = a$,

und wegen $\|Af\| < \infty$ <u>überall definiert</u>, $D_A = \mathcal{L}_2^a$.

Sei jetzt $a \to \infty$. Dann ist A unbeschränkt, aber auch nicht mehr überall definiert.

Betrachte beispielsweise die Funktion

$$f(x) = \begin{cases} 0 & \\ & \text{für} \\ \frac{1}{x} & \end{cases} \begin{array}{l} x < 1 \\ \\ x \geq 1. \end{array}$$

Wegen

$$\|f\| = \sqrt{\int_0^\infty dx\,|f(x)|^2} = \sqrt{\int_1^\infty \frac{dx}{x^2}} = \sqrt{\left[-\frac{1}{x}\right]_1^\infty} = 1$$

ist $f \in \mathcal{L}_2^\infty$.

Aber $Af(x) = xf(x) \notin \mathcal{L}_2^\infty$, denn

$$\|Af\| = \sqrt{\int_0^\infty dx\,x^2|f(x)|^2} = \sqrt{\int_1^\infty dx} = \infty.$$

Folglich ist der unbeschränkte Operator A nicht überall definiert.

<u>Beweis</u> des Satzes:

Sei $D_A = \mathcal{H}$. Angenommen A unbeschränkt. Dann gibt es eine Folge $f_n \in \mathcal{H}$ mit $c_n := \frac{\|Af_n\|}{\|f_n\|} \to \infty$.

Die Abbildung $l_n(g) := \left\langle A\frac{f_n}{\|f_n\|}, g \right\rangle$ für festes n ist linear, überall definiert und beschränkt, letzteres wegen

$$|l_n(g)| \leq \left\| A\frac{f_n}{\|f_n\|} \right\| \|g\|.$$

Dies besagt, daß die Norm des Operators l_n $\|l_n\| = c_n$ ist.

Auf der anderen Seite ist die Folge $l_n(g)$ für festes g beschränkt,

$$|l_n(g)| = \left| \left\langle \frac{f_n}{\|f_n\|}, A^\dagger g \right\rangle \right| \leq \|A^\dagger g\|.$$

Nach dem Satz von Banach und Steinhaus folgt die Existenz einer universellen Beschränkungskonstanten c,

$$\|l_n\| \leq c \text{ für alle } n,$$

im Widerspruch zu $\|l_n\| = c_n \to \infty$.

$\square$

Es kann gezeigt werden (van Winter 1968), daß die Kugelflächenfunktionen Y_{lm} im Definitionsbereich der Differentialoperatoren $\mathbf{L}^2$, L_z liegen. Sie sind somit Lösungen der Differentialgleichungen (4), (5).

Für $l, m \notin \mathbf{Z}$ liegen die Y_{lm} aber nicht mehr im Definitionsbereich der Drehimpulsvertauschungsrelation (3).

Die Ersetzungsvorschrift (6) ist also nicht zu den fundamentalen Vertauschungsrelationen (1) äquivalent und führt auf falsche Resultate.

Kann die Ersetzungsvorschrift evtl. abgeändert werden?

Erinnerung: Ursprünglich gab es zwei Formulierungen der Quantenmechanik, die Wellenmechanik und die Matrizenmechanik. Deren Äquivalenz wurde bald festgestellt.

Für praktische Rechnungen erwies sich die Wellenmechanik als überlegen. Dies führte zu einer „Verselbständigung“ der Wellenmechanik, und viele Physiker sahen die Ersetzungsvorschrift (6) als Grundprinzip der Quantenmechanik an.

Sie ist aber nur eine von vielen möglichen Darstellungen der Quantenmechanik.

In dieser Darstellung ist der Operator L_z durch (7) gegeben.

Konstruktion von mehrdeutigen Wellenfunktionen (Kretzschmar, Z. Phys. **185** (1965), 73)

Der Operator der z-Komponente des Bahndrehimpulses sei gegeben durch $L_z^0 = L_z$ aus (7). Zusammen mit der Randbedingung $\psi(\varphi+2\pi) = \psi(\varphi)$ sind seine Eigenfunktionen eindeutig,

$$\psi_m^0(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \quad , \quad m \in \mathbf{Z}.$$

Sie bilden eine Basis des Hilbertraums aller auf dem Intervall $[0, 2\pi)$ quadratintegrablen Funktionen.

Sei $b \in \mathbf{R}$. Definiere eine neue Basis

$$\psi_m^b(\varphi) = e^{ib\varphi} \psi_m^0(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(m+b)\varphi} \quad , \quad m \in \mathbf{Z},$$

aus für $b \notin \mathbf{Z}$ <u>mehrdeutigen</u> Funktionen

$$\psi(\varphi + 2\pi) = e^{i2\pi b} \psi(\varphi).$$

Die zugehörige Transformation von L_z^0 lautet

$$L_z^b = e^{ib\varphi} L_z^0 e^{-ib\varphi} = -b\hbar - i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}.$$

Verallgemeinerung:

Sei $g(\varphi)$ reell und integrierbar auf $[0, 2\pi)$ und so normiert, daß

$$f(\varphi) := \int_0^\varphi d\varphi' g(\varphi')$$

die Bedingung $\lim\limits_{\epsilon \to 0} f(2\pi - \epsilon) = 2\pi b$ erfüllt.

Die Funktionen

$$\psi_m^{(g)}(\varphi) := e^{if(\varphi)} \psi_m^0(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(m\varphi + f(\varphi))}$$

erfüllen die Randbedingung $\lim\limits_{\epsilon \to 0} \psi_m^{(g)}(2\pi - \epsilon) = e^{i2\pi b} \psi_m^0(0)$ und sind Eigenfunktionen zum Operator

$$L_z^{(g)} = e^{if(\varphi)} L_z^0 e^{-if(\varphi)} = -\hbar g(\varphi) - i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

Wir erhalten eine durch g parametrisierte Menge von Darstellungen $L_z^{(g)}$ des Drehimpulsoperators.

Aufhebung der Einschränkung $0 \leq \varphi < 2\pi$ auf zwei verschiedene Weisen:

1. Periodische Fortsetzung von g, $g(\varphi + 2\pi n) := g(\varphi), n \in \mathbf{Z}$, f definiert wie bisher. $\psi_m^{(g)}$ ist stetig, aber i.a. mehrdeutig. Für Berechnung physikalisch relevanter Größen Einschränkung auf ein beliebiges Intervall $[\varphi_0, \varphi_0 + 2\pi)$ der Länge 2π

2. Periodische Fortsetzung von f. Dann ist $\psi_m^{(g)}$ eindeutig, i.a. unstetig. Zur Wahrung der Definition von f und der Randbedingung für $\psi_m^{(g)}$ definiere für $0 \leq \varphi < 2\pi$

   $$G(\varphi) := g(\varphi) - 2\pi b \delta(\varphi)$$

   und periodisch fortgesetzt. Dann gilt

   $$f(\varphi) = \lim_{\epsilon \to 0} \int_\epsilon^\varphi d\varphi' \, G(\varphi')$$

Also: Äquivalenz zwischen mehrdeutigen stetigen und eindeutigen unstetigen Wellenfunktionen

Zur Diskussion: Ein Argument für die Richtigkeit des Eindeutigkeitsarguments

In der eindimensionalen Wellenmechanik lernt man, daß die Wellenfunktion überall stetig ist.
Dieses Ergebnis läßt sich auf drei Dimensionen verallgemeinern.

Daraus folgt noch nicht die Eindeutigkeit der Wellenfunktion, denn diese kann als Funktion von φ stetig und trotzdem an den Stellen φ und $\varphi + 2\pi$ verschieden sein.

Aber: Verwendet man kartesische Koordinaten, so ist jedem Punkt im Raum eindeutig ein Satz von Koordinaten (x, y, z) zugeordnet.
Bedeutet dann die Stetigkeit von $\psi(x, y, z)$ nicht auch die Eindeutigkeit der Wellenfunktion?

$$[q_j, p_k] = i\hbar\delta_{jk}\mathbf{1} \tag{1}$$

$$\mathbf{L} = \mathbf{q} \times \mathbf{p} \tag{2}$$

$$[L_j, L_k] = i\hbar\epsilon_{jkm}L_m \tag{3}$$

$$\mathbf{L}^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle \tag{4}$$

$$L_z |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle \tag{5}$$

$$\mathbf{q} \to \mathbf{r} \quad , \quad \mathbf{p} \to \frac{\hbar}{i}\nabla \tag{6}$$

$$L_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi} \tag{7}$$

$$[L_+, A_-^n] = 2\hbar A_z^n \tag{8}$$

$$[L_z, A_-^n] = -\hbar A_-^n \tag{9}$$

$$A_z^n |n, n\rangle = -\mathbf{K} \cdot \mathbf{L} |n, n\rangle \tag{10}$$

$$A_+^n A_-^n |n, n\rangle = 2\hbar^2 n\mathbf{K}^2 |n, n\rangle \tag{11}$$