

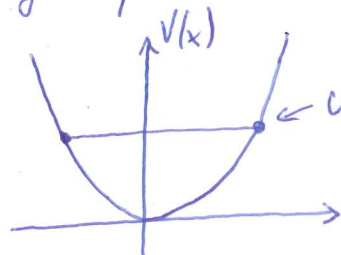
7) Abstrakte, wirkführende Beispielsysteme

34

a) Harmonischer Oszillator

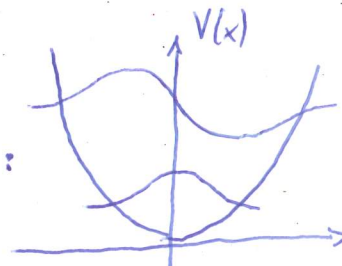
Erinnerung: $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$ mit $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ $\leftrightarrow V = \frac{1}{2} k x^2$
 Federhooke'sche

Bewegung im quadratischen Potential:



siehe Blatt 2, Übung 2

$F = -kx$
 $\rightarrow$ lineare Rückstellkraft



Erwartung: Gebundene Zustände mit diskreten Energien:

Eigenzustände von $\hat{H}$?

Annahme: Zwei Operatoren teilen sich das Eigenzustandsspektrum, wenn der Kommutator verschwindet!

Hier: $[\hat{H}, \hat{p}] = \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2, \hat{p} \right] = \frac{1}{2} m \omega^2 [\hat{x}^2, \hat{p}]$
 $= \frac{1}{2} m \omega^2 \left\{ \hat{x} [\hat{x}, \hat{p}] + [\hat{x}, \hat{p}] \hat{x} \right\} = \frac{1}{2} m \omega^2 2i\hbar \hat{x} \neq 0$

$[\hat{H}, \hat{x}] \neq 0$

Daher: Eigenzustände von $\hat{H}$ sind nicht Eigenzustände von $\hat{x}$ oder $\hat{p}$!

Aber: vgl. Blatt 6, Übung 2 Definition von $\hat{a}$ und $\hat{a}^\dagger$

$\rightarrow$ Linearkombination von $\hat{x}$ und $\hat{p}$ könnte mit $\hat{H}$ kommutieren hilfreich sein:

$\hat{a}, \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} \left(\sqrt{m\omega} \hat{x} \pm \frac{i}{\sqrt{m\omega}} \hat{p} \right)$ $\hat{a}$ nicht hermitisch!

adjungierter Operator wegen $\hat{x}^\dagger = \hat{x}$ und $\hat{p}^\dagger = -\hat{p}$ (hermitisch!)

Es folgt: $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \frac{1}{2\hbar} \left[\sqrt{m\omega} \hat{x} + \frac{i}{\sqrt{m\omega}} \hat{p}, \sqrt{m\omega} \hat{x} - \frac{i}{\sqrt{m\omega}} \hat{p} \right]$
 $= \frac{1}{2\hbar} \left([\sqrt{m\omega} \hat{x}, -\frac{i}{\sqrt{m\omega}} \hat{p}] + [\frac{i}{\sqrt{m\omega}} \hat{p}, \sqrt{m\omega} \hat{x}] \right)$
 $= \frac{1}{\hbar} \left[\frac{i}{\sqrt{m\omega}} \hat{p}, \sqrt{m\omega} \hat{x} \right] = \frac{i}{\hbar} [\hat{p}, \hat{x}] = \frac{i}{\hbar} (-i\hbar) = 1$

Addition und Subtraktion liefert:

$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$, $\hat{p} = -i \sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)$

Damit wird:

(31)

$$\begin{aligned}\hat{H} &= -\frac{1}{2m} \frac{\hbar m \omega}{2} \left(\hat{a} - \hat{a}^\dagger \right)^2 + \frac{m \omega^2}{2} \frac{\hbar}{2m \omega} \left(\hat{a} + \hat{a}^\dagger \right)^2 \\ &= \frac{\hbar \omega}{4} \left(\left(\hat{a} + \hat{a}^\dagger \right)^2 - \left(\hat{a} - \hat{a}^\dagger \right)^2 \right) \\ &= \frac{\hbar \omega}{4} \left(\hat{a}^2 + \hat{a} \hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a}^{\dagger 2} - \left(\hat{a}^2 - \hat{a} \hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a}^{\dagger 2} \right) \right) \\ &= \frac{\hbar \omega}{2} \left(\underbrace{\hat{a} \hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger \hat{a}}_{= \hat{a}^\dagger \hat{a} + [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger \hat{a} + 1} \right) \\ &= \frac{\hbar \omega}{2} \left(2 \hat{a}^\dagger \hat{a} + 1 \right) = \hbar \omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right)\end{aligned}$$

Definiere $\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$:

- $\hat{N}$ ist hermitesch, da $(\hat{a}^\dagger \hat{a})^\dagger = (\hat{a})^\dagger (\hat{a}^\dagger)^\dagger = \hat{a}^\dagger \hat{a}$
- Eigenzustände von $\hat{H}$ sind Eigenzustände von $\hat{N}$, denn:

$$[\hat{H}, \hat{N}] = [\hbar \omega \hat{N} + \frac{1}{2} \hbar \omega, \hat{N}] = 0$$

Wir benötigen desweiteren: $[\hat{a}, \hat{N}]$

$$\begin{aligned}\hat{a} \hat{N} &= \hat{a} \hat{a}^\dagger \hat{a} = (\hat{a} \hat{a}^\dagger) \hat{a} = \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \underbrace{[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]}_1 \right) \hat{a} \\ &= (\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1) \hat{a} = \hat{N} \hat{a} + \hat{a}\end{aligned}$$

$$\rightarrow [\hat{a}, \hat{N}] = \hat{a} \hat{N} - \hat{N} \hat{a} = \hat{a}$$

$$\text{ebenso: } \hat{a}^\dagger \hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger \hat{a} = \hat{a}^\dagger \left(\hat{a} \hat{a}^\dagger + \underbrace{[\hat{a}^\dagger, \hat{a}]}_{=-1} \right) = \hat{N} \hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger$$

$$\rightarrow [\hat{a}^\dagger, \hat{N}] = -\hat{a}^\dagger$$

Potenzen folgen durch "Durchziehen" des Operators / rekursives Vorgehen:

$$\begin{aligned}\hat{a}^2 \hat{N} &= \hat{a}^2 \hat{a}^\dagger \hat{a} = \hat{a} (\hat{a} \hat{N}) = \hat{a} (\hat{N} \hat{a} + \hat{a}) \\ &= \hat{a} \hat{N} \hat{a} + \hat{a}^2 = (\hat{N} \hat{a} + \hat{a}) \hat{a} + \hat{a}^2 = \hat{N} \hat{a}^2 + 2 \hat{a}^2\end{aligned}$$

$$\rightarrow \hat{a}^3 \hat{N} = \hat{N} \hat{a}^3 + 3 \hat{a}^3$$

$$\rightarrow [\hat{a}^q, \hat{N}] = q \hat{a}^q \quad \text{mit } q = 1, 2, \dots$$

$$[\hat{a}^{q+1}, \hat{N}] = -q \hat{a}^{q+1}$$

Eigenwertproblem von $\hat{N}$: Eigenwerte n , Eigenzustände $|n\rangle$

$$\rightarrow \hat{N} |n\rangle = n |n\rangle$$

$\rightarrow$ Was ist n ? Wieviele $|n\rangle$?

Anwendung von $\hat{a}^q$ auf die Eigenwertgl. von $\hat{N}$ liefert:

$$\hat{a}^q \hat{N} |u\rangle = \hat{a}^q u |u\rangle = u \hat{a}^q |u\rangle$$

$$\hat{a}^q \hat{N} |u\rangle = (\hat{N} \hat{a}^q + q \hat{a}^q) |u\rangle$$

$$\rightarrow \hat{N} (\hat{a}^q |u\rangle) = (u - q) (\hat{a}^q |u\rangle)$$

$\rightarrow \hat{a}^q |u\rangle$ sind Eigenzustände zu $\hat{N}$ mit Eigenwert $(u - q)$, $q = 1, 2, 3, \dots$

Aber: $\bullet$ $u = \langle u | \hat{N} | u \rangle = \langle u | \hat{a}^\dagger \hat{a} | u \rangle = (\hat{a} | u \rangle)^\dagger (\hat{a} | u \rangle) \geq 0$
 $\uparrow$ pos. def.
 $\langle u | u \rangle = 1$

$\bullet$ Für $u = q$ gilt: $\hat{N} (\hat{a}^q |u\rangle) = \underbrace{(u - q)}_{=0} (\hat{a}^q |u\rangle) = |0\rangle$

$\bullet$ Eigenzustände von $\hat{N}$ zum Eigenwert n sind Eigenzustände von $\hat{H}$ ($[\hat{H}, \hat{N}] = 0$) mit Eigenwert $\hbar \omega (n + \frac{1}{2})$.

Es soll sein $E > 0$!

$\Rightarrow n$ ganzzahlig positiv.

$\hat{a}$ verringert n um 1 bis zum Zustand $|0\rangle$: $\hat{a} |0\rangle = |0\rangle$

Anwendung von $\hat{a}^{+q}$ auf die Eigenwertgl. von $\hat{N}$ liefert:

$$\hat{a}^{+q} \hat{N} |u\rangle = (\hat{N} \hat{a}^{+q} - q \hat{a}^{+q}) |u\rangle = u \hat{a}^{+q} |u\rangle$$

$$\rightarrow \hat{N} (\hat{a}^{+q} |u\rangle) = (u + q) (\hat{a}^{+q} |u\rangle)$$

$\Rightarrow \hat{a}^+$ erhöht n um 1.

Man nennt $\hat{a}$ und $\hat{a}^+$ Ladderoperatoren:

Wir möchten diese noch normieren:

$\hat{a} |u\rangle = c \underbrace{|u-1\rangle}_{\text{Neuer Zustand zum Eigenwert } u-1 \text{ von } \hat{N}}$

$$1 = \langle u-1 | u-1 \rangle = \frac{1}{|c|^2} \langle \hat{a} u | \hat{a} u \rangle$$

$$= \frac{1}{|c|^2} \langle u | \hat{a}^\dagger \hat{a} | u \rangle = \frac{1}{|c|^2} u \langle u | u \rangle = \frac{u}{|c|^2}$$

$$\rightarrow \hat{a} |u\rangle = \sqrt{u} |u-1\rangle \quad (\text{vgl. } \hat{a} |0\rangle = |0\rangle)$$

$$\text{Ebenso gilt: } \hat{a}^+ |u\rangle = \sqrt{u+1} |u+1\rangle \quad (\text{vgl. } \hat{a}^+ |0\rangle = |1\rangle)$$

$$\text{Insgesamt: } |n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^+)^n |0\rangle \rightarrow \hat{a}^+ \text{ erzeugt Zustände.}$$

Namensgebung: $\hat{a}$ Vernichtungsoperator, Abschiebeoperator
 $\hat{a}^+$ Erzeugungsoperator, Aufschiebeoperator
 $\hat{N}$ Besetzungszahloperator

Eigenwertgleichung für $\hat{H}$: $\hat{H} |u\rangle = \hbar \omega (u + \frac{1}{2}) |u\rangle$

- Grundzustand $|0\rangle$ hat Nullpunktsenergie $\frac{\hbar \omega}{2} > 0$!
- Anregungen in Abh. von $\hbar \omega$

vgl. Spektrum
 ∞ -Potenzialtopf
 $\propto n^2$

Anmerkungen:

- Vergleich mit Planck'schem Strahlungsgesetz:

Elementare Oszillatoren mit Energie $\hbar\omega$!

- Grundlegendes System zur Beschreibung fast aller elementaren

Anregungen von Quantenfeldern = Elementarteilchen

$\rightarrow a^\dagger = a^\dagger(\vec{k}) \hat{=} \text{Anregung eines Quantenfelds mit Impuls } \vec{k}$

Begriff: Zweite Quantisierung ($\rightarrow$ Fdt. Wikipedia)

Beispiel: Zustand von 2-Teilchen mit Impuls $\vec{p}$ und $\vec{k}$:

$$a^\dagger(\vec{p}) a^\dagger(\vec{k}) |0\rangle$$

Bosonen: $a^\dagger(\vec{p}) a^\dagger(\vec{k}) = + a^\dagger(\vec{k}) a^\dagger(\vec{p})$

Fermionen: $a^\dagger(\vec{p}) a^\dagger(\vec{k}) = - a^\dagger(\vec{k}) a^\dagger(\vec{p}) \rightarrow \text{Pauli-Prinzip}$

6) Drehimpuls

35

Definition: $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \rightarrow \hat{L} = \hat{r} \times \hat{p}$

Wegen $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij}$ folgt:

$$[\hat{L}_1, \hat{L}_2] = [\hat{x}_2 \hat{p}_3 - \hat{x}_3 \hat{p}_2, \hat{x}_3 \hat{p}_1 - \hat{x}_1 \hat{p}_3]$$

$$= \hat{x}_2 [\hat{p}_3, \hat{x}_3] \hat{p}_1 + \hat{x}_1 [\hat{x}_3, \hat{p}_3] \hat{p}_2 = i\hbar (\hat{x}_1 \hat{p}_2 - \hat{x}_2 \hat{p}_1) = i\hbar \hat{L}_3$$

Genauso: $[\hat{L}_2, \hat{L}_3] = i\hbar \hat{L}_1, [\hat{L}_3, \hat{L}_1] = i\hbar \hat{L}_2$ vgl. Übung 7, Aufg. 2

Casimir-Operator: $\vec{L}^2 = L_1^2 + L_2^2 + L_3^2$

Es folgt: $[\hat{L}^2, \hat{L}_1] = [\hat{L}^2, \hat{L}_2] = [\hat{L}^2, \hat{L}_3] = 0$ vgl. Übung 7, Aufg. 2

Daher: $\hat{L}^2$ und $\hat{L}_1$ haben das gleiche Eigenwertspektrum

$\rightarrow \hat{L}_1$ hebt Entartung von Eigenwerten auf.

Genauso: $\hat{L}^2$ und $\hat{L}_2$ oder $\hat{L}^2$ und $\hat{L}_3$

Wähle motiviert durch Kugelkoordinaten den Satz: $\hat{L}^2$ und $\hat{L}_3$

Definiere nun: $\hat{L}_{\pm} = \hat{L}_1 \pm i\hat{L}_2$

Diese erfüllen: $[\hat{L}_3, \hat{L}_{\pm}] = [\hat{L}_3, \hat{L}_1] \pm i[\hat{L}_3, \hat{L}_2] = \pm \hbar \hat{L}_{\pm}$

$[\hat{L}_+, \hat{L}_-] = 2\hbar \hat{L}_3$

$[\hat{L}^2, \hat{L}_{\pm}] = 0$

$\hat{L}_+ \hat{L}_- = \hat{L}^2 - \hat{L}_3^2 + \hbar \hat{L}_3$ (1)

$\hat{L}_- \hat{L}_+ = \hat{L}^2 - \hat{L}_3^2 - \hbar \hat{L}_3$ (2)

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

$\hat{L}_3 |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle$

Es gilt wieder für die Eigenwertgleichungen:

Zustand eindeutig charakterisiert durch l, m : $|l, m\rangle$!

Die EW von $\hat{L}^2$ müssen wieder positiv sein: $\langle \psi | \hat{L}^2 | \psi \rangle \geq 0$ mit $|\psi\rangle = |l, m\rangle$

$\hookrightarrow l(l+1)\hbar^2 \langle \psi | \psi \rangle \geq 0$

Es ist: $-l \leq m \leq l$

$|\hat{L}_{\pm} |l, m\rangle|^2 \geq 0 \rightarrow \langle l, m | \hat{L}_{\pm}^\dagger \hat{L}_{\pm} | l, m \rangle \geq 0 \xrightarrow{(1)} l(l+1) - m^2 + m \geq 0$ (3)

$\rightarrow \langle l, m | \hat{L}_{\mp} \hat{L}_{\pm} | l, m \rangle \geq 0 \xrightarrow{(2)} l(l+1) - m^2 - m \geq 0$ (4)

Es folgt: (4) $(l-m)(l+m+1) \geq 0 \rightarrow -(l+1) \leq m \leq +l$

(3) $(l+m)(l-m+1) \geq 0 \rightarrow -l \leq m \leq l+1$

Außerdem: $\hat{L}_3 \hat{L}_- |l, m\rangle = \hat{L}_- \hat{L}_3 |l, m\rangle - \hbar \hat{L}_- |l, m\rangle = (m-1)\hbar (\hat{L}_- |l, m\rangle)$

$\rightarrow \hat{L}_-$ erniedrigt Eigenwert von $\hat{L}_3$ um 1!

$\rightarrow \hat{L}_{\pm}$ sind wieder Leiteroperatoren.

Somit ist unser Eigenwertspektrum: $-l \leq m \leq l$
Die Werte von l sind ganz- oder halbzahlig und hängen vom System ab, z.B.
Drehimpuls $l \in \mathbb{N}_0$, Spin-Systeme:

Bosonen l ganzzahlig $0, 1, 2, \dots$
Fermionen l halbzahlig $1/2, 3/2, 5/2, \dots$

c) Drehimpuls in der Ortsdarstellung

Für $\hat{L}_3$ gilt: $\hat{L}_3 = \hat{x}_1 \hat{p}_2 - \hat{x}_2 \hat{p}_1 = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$
mit $\hat{x}_i = x_i, \hat{p}_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}$ (Ortsdarstellung!)

Wir wechseln in Kugelkoordinaten:

$$\begin{aligned} x &= r \sin\vartheta \cos\varphi & \vartheta &\in [0, \pi] \\ y &= r \sin\vartheta \sin\varphi & \varphi &\in [0, 2\pi] \\ z &= r \cos\vartheta \end{aligned}$$

Konvention geändert!

Dann ist: $\frac{\partial}{\partial \varphi} = \frac{\partial x}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial \varphi} \frac{\partial}{\partial z}$
 $= -r \sin\vartheta \sin\varphi \frac{\partial}{\partial x} + r \sin\vartheta \cos\varphi \frac{\partial}{\partial y}$
 $= x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} = -\frac{\hat{L}_3}{i\hbar}$

$\rightarrow \hat{L}_3 = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$

Genauso: $\hat{L}_1 = i\hbar \left(\sin\varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\tan\vartheta} \cos\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$ $\hat{L}_2$ später
 $\hat{L}_2 = i\hbar \left(-\cos\varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\tan\vartheta} \sin\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$

Form von $\hat{L}_3$ motiviert die Wahl von $\hat{L}^2$ und $\hat{L}_3$ als Satz unabhängiger Observablen.

Eigenwertgleichung von $\hat{L}_3 = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle$
 $\hookrightarrow |l, m\rangle \propto e^{im\varphi}$ im Ortsraum!

Ohne Beweis sind die Eigenzustände von $\hat{L}^2$ und $\hat{L}_3$ die Kugelfunktionen

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} N_{lm} P_{lm}(\cos\vartheta) e^{im\varphi}$$

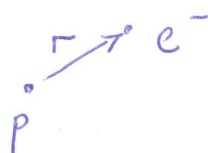
mit $N_{lm} = \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}}$

$P_{lm}(x)$ zugeordnete Legendre-Polynome

$= \langle \vartheta, \varphi | l, m \rangle$

Im Ortsraum: $\hat{L}^2 Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$
 $\hat{L}_3 Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = m\hbar Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$

↖ Projektion in die Ortsdarstellung!



$$m_p \gg m_e$$

→ Proton in Ruhe

~ Schwerpunkt / Ursprung in dem Proton

Coulomb-Potential nur abhängig vom Relativradius $|\vec{r}| = r$

$$V(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$

$V(r)$ hängt in Kugelkoordinaten nicht von den Richtungen ϑ und φ ab

→ Formulierung in Kugelkoordinaten (zyklische Variable!):

$$x = r \sin\vartheta \cos\varphi$$

$$y = r \sin\vartheta \sin\varphi$$

$$z = r \cos\vartheta$$

Wir benötigen $\vec{\nabla}^2$ in Kugelkoordinaten:

$$\vec{\nabla}^2 f(x, y, z) = \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x, y, z) + \frac{\partial^2}{\partial y^2} f + \frac{\partial^2}{\partial z^2} f$$

$$\rightarrow \vec{\nabla}^2 f(r, \vartheta, \varphi) = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r f) + \frac{1}{r^2} \left(\frac{1}{\sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin\vartheta \frac{\partial f}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} \right)$$

$$\rightarrow \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(r)$$

klassisch: keine Abhängigkeit von φ , und φ → zyklische Variable → Drehimpulsch.

Anmerkung: Die nachfolgende Diskussion funktioniert mit allen kugelsym. Potentialen,

z.B. - Coulomb-Potential

- sphärischer Oszillator

- sphärischer Potentialtopf

$$\frac{q_1 q_2}{r}$$

$$\frac{m\omega^2}{2} r^2$$

$$\begin{cases} -V_0 & \text{falls } r < r_0 \\ 0 & \text{falls } r \geq r_0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} -V_0 & \text{falls } r < r_0 \\ 0 & \text{falls } r \geq r_0 \end{cases}$$

Kinischer Anteil der Winkelbewegung lässt sich wieder mit Drehimpulserhaltung verbinden. Es folgt (vgl. effektives Potential!):

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(r)$$

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

$$\text{mit } \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2} = \frac{1}{\sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin\vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

$$\text{Wir wissen: } [\hat{H}, \hat{L}^2] = [\hat{H}, \hat{L}_i] = [\hat{L}_i, \hat{L}^2] = 0$$

→ Gemeinsamer Satz von Eigenzuständen / Eigenfunktionen im Ortsraum
z.B. $\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_3$

→ Separationsansatz: $\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) W(\vartheta, \varphi)$ → Entkopplung aufgetrennt

Schon bekannt:

$$W(\vartheta, \varphi) = Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

Kugelflächenfunktionen

Drehimpulsquantenzahl / magnetische Quantenzahl

$$l = 0, 1, 2, \dots \equiv s, p, d, f \text{ -Orbital}$$

$$m = -l, \dots, l$$

Zustände zu festem l , $m = -l, \dots, l$ haben die gleiche Energie.

→ Separationsansatz liefert Eigenfunktionen charakterisiert durch

3 Quantenzahlen $n, l, m \rightarrow |n, l, m\rangle$:

$$\text{im Ortsraum } \Psi_{n, l, m}(r, \vartheta, \varphi) = R_{n, l}(r) Y_{l, m}(\vartheta, \varphi)$$

Eigenwertgleichungen:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r R_{n, l}(r) + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_{n, l}(r) = E_{n, l} R_{n, l}(r)$$

$$\hat{L}^2 Y_{l, m}(\vartheta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{l, m}(\vartheta, \varphi)$$

$$L_z Y_{l, m}(\vartheta, \varphi) = \hbar m Y_{l, m}(\vartheta, \varphi)$$

Darstellung der Kugelflächenfunktionen (spherical harmonics)

Erinnerung:

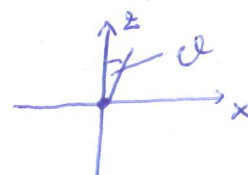
$$Y_{l, m}(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} N_{l, m} P_{l, m}(\cos \vartheta) e^{im\varphi}$$

graphisch: $|Y_{l, m}(\vartheta, \varphi)|^2$

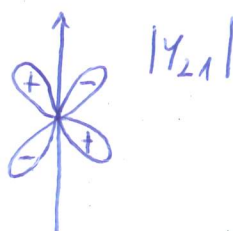
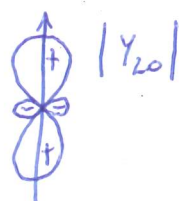
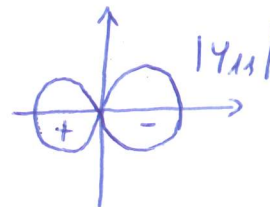
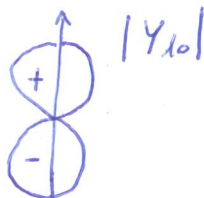
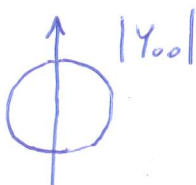
Symmetrie bzgl. z-Achse

→ Zeichne z-x-Ebene!

→ Polardiagramme



...



usw.

Discussion der Radialgleichung für das H-Atom:

(39)

$$V(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \quad \text{Coulomb-Potential}$$

Ohne Beweis ergibt eine Rechnung:

Eigenfunktionen $R_{nl}(r)$ mit $n=1,2,3,\dots$
 $l=0,\dots,n-1 \leftarrow$ heißt Entartung im $\hat{H}$ auf.

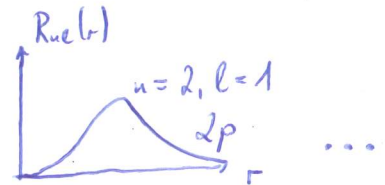
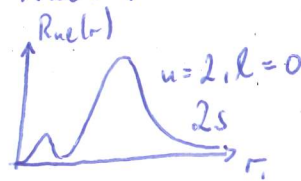
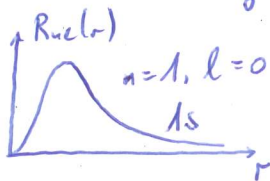
mit gleichen Energien E_n für jedes l :

$$E_{nl} = E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -13,6 \text{ eV} \frac{1}{n^2} \quad (\text{vgl. Spektrumsdiskussion am Anfang})$$

$$R_{nl}(r) \propto e^{-\alpha r} \cdot (\text{Polynom in } r) \quad \text{Laguerre-Polynome}$$

$$= \propto r^{l+1} + \dots + r^n$$

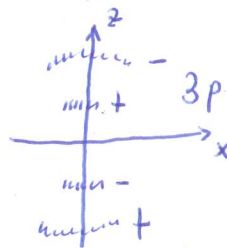
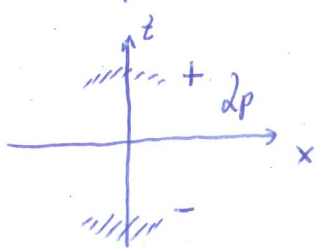
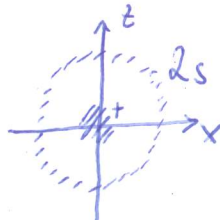
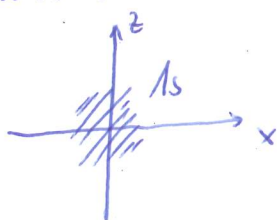
Graphische Darstellung von $R_{nl}(r)$:



Die gesamte räumliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit folgt aus $|\Psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi)|^2 = |R_{nl}(r)|^2$

Quantenzahlen: $n, l, m \rightarrow nl = 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d, \dots$

Fall $m=0$:



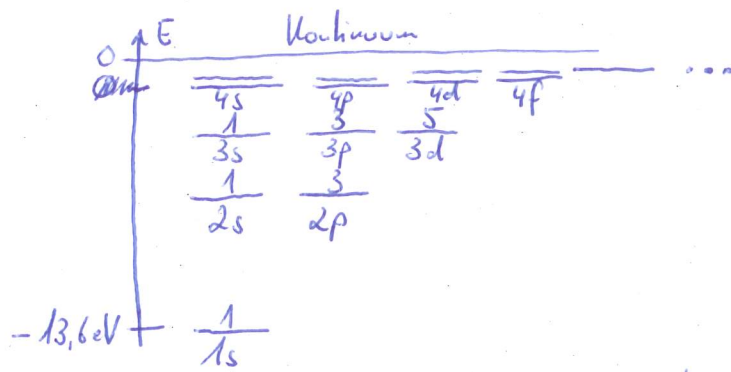
$\rightarrow$ Orbitale!

Entartung bzgl. l wird durch m aufgehoben:

$l=0$	$l=1$	$l=2$	$l=3$
$m=0$	$m=1, 0, -1$	$m=2, 1, 0, -1, -2$	$m=3, 2, 1, 0, -1, -2, -3$
1 Zustand	3 Zustände	5 Zustände	7 Zustände

Spektrum des H-Atoms:

(40)



Das Elektron hat Spin $\frac{1}{2} \rightarrow 2$ Zustände mit Spin $\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$
 $\rightarrow$ Jedes Niveau charakterisiert durch n, l, m kann mit 2 Elektronen besetzt werden (Pauli-Prinzip).

Zusammenfassung: Ein vollständiger Satz von Observablen für das H-Atom ist gegeben durch $\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z$!

$\rightarrow$ Eigenfunktionen sind eindeutig charakterisierbar durch 3 Eigenwerte = 3 Quantenzahlen:

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

$$l = 0, \dots, n-1 \quad \leftarrow \text{hebt Entartung in } n \text{ auf}$$

$$m = -l, \dots, l \quad \leftarrow \text{hebt Entartung in } l \text{ auf}$$

Jeder Zustand lässt sich mit 2 Elektronen besetzen.

Vergleichung: Periodensystem:

	Z	Element	1s	2s	2p	
	1	H	1			Anzahl Elektronen in Zustand n, l
Edelgase	2	He	2			
	3	Li	2	1		
	4	Be	2	2		
	5	B	2	2	1	
	6	C	2	2	2	
	7	N	2	2	3	
	8	O	2	2	4	
	9	F	2	2	5	
Edelgase	10	Ne	2	2	6	
	...		↑	↑	↑	
			$2 \max$	$2 \max$	$3 \cdot 2 = 6 \max$	

$\rightarrow$ Die Elektronenkonfiguration in Orbitalen erklärt das Periodensystem der Elemente.