7) Abstrakte, weiterführende Beispielsysteme

a) Harmonischer Oszillator

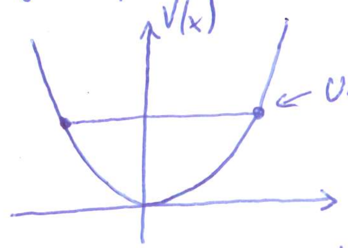
Erinnerung: $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$ mit $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ $\leftrightarrow$ $V = \frac{1}{2} k x^2$

$\uparrow$ Federkonstante

$F = -kx$

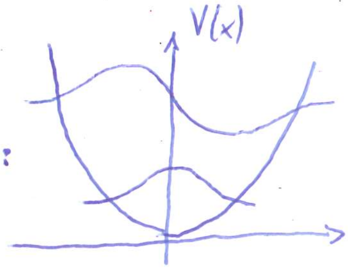
$\rightarrow$ lineare Rückstellkraft

Bewegung im quadratischen Potential:



$\leftarrow$ Umkehrpunkte siehe Blatt 2, Übung 2

Erwartung: Gebundene Zustände mit diskreten Energien:



Eigenzustände von $\hat{H}$?

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

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

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

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

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

Aber: vgl. Blatt 6, Übung 2 Definition von $\tilde{q}$ und $\tilde{p}$

$\rightarrow$ Linearkombination von $\hat{x}$ und $\hat{p}$ könnte ~~mit $\hat{H}$ vertauschen~~ 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 hermitesch!

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

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

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

$$= \frac{1}{\hbar} \left[\frac{i}{\sqrt{m\omega}} \hat{p}, \sqrt{m\omega}\, \hat{x} \right] = \frac{i}{\hbar} [\hat{p}, \hat{x}] = \frac{i}{\hbar} (-i\hbar) = 1$$

Addition und Subtraktion liefert:

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

Damit wird:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2m}\frac{\hbar m\omega}{2}\left(\hat{a}-\hat{a}^+\right)^2 + \frac{m\omega^2}{2}\frac{\hbar}{2m\omega}\left(\hat{a}+\hat{a}^+\right)^2$$

$$= \frac{\hbar\omega}{4}\left(\left(\hat{a}+\hat{a}^+\right)^2 - \left(\hat{a}-\hat{a}^+\right)^2\right)$$

$$= \frac{\hbar\omega}{4}\left(\hat{a}^2 + \hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}^{+2} - \left(\hat{a}^2 - \hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}^{+2}\right)\right)$$

$$= \frac{\hbar\omega}{2}\left(\underbrace{\hat{a}\hat{a}^+}_{= \hat{a}^+\hat{a} + [\hat{a},\hat{a}^+] = \hat{a}^+\hat{a} + 1} + \hat{a}^+\hat{a}\right)$$

$$= \frac{\hbar\omega}{2}\left(2\hat{a}^+\hat{a} + 1\right) = \hbar\omega\left(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}\right)$$

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

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

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

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

$$\hat{a}\hat{N} = \hat{a}\hat{a}^+\hat{a} = (\hat{a}\hat{a}^+)\hat{a} = (\hat{a}^+\hat{a} + \underbrace{[\hat{a},\hat{a}^+]}_{1})\hat{a}$$

$$= (\hat{a}^+\hat{a} + 1)\hat{a} = \hat{N}\hat{a} + \hat{a}$$

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

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

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

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

$$\hat{a}^2\hat{N} = \hat{a}^2\hat{a}^+\hat{a} = \hat{a}(\hat{a}\hat{N}) = \hat{a}(\hat{N}\hat{a} + \hat{a})$$

$$= \hat{a}\hat{N}\hat{a} + \hat{a}^2 = (\hat{N}\hat{a} + \hat{a})\hat{a} + \hat{a}^2 = \hat{N}\hat{a}^2 + 2\hat{a}^2$$

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

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

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

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:

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

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

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

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

Aber: • $\underset{\uparrow\ \langle n|n\rangle = 1}{n =} \langle n|\hat{N}|n\rangle = \langle n|\hat{a}^{+}\hat{a}|n\rangle = (\hat{a}|n\rangle)^{+}(\hat{a}|n\rangle) \underset{\uparrow\ \text{pos. def.}}{\geq} 0$

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

• 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:

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

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

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

Man nennt $\hat{a}$ und $\hat{a}^{+}$ Leiteroperatoren.

Wir möchten diese noch normieren: ~~Eigenwertgl.~~ $\hat{a}|n\rangle = c\,\underbrace{|n-1\rangle}_{\text{Neuer Zustand zum Eigenwert } n-1 \text{ von } \hat{N}}$

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

$$= \frac{1}{|c|^2}\langle n|\hat{a}^{+}\hat{a}|n\rangle = \frac{1}{|c|^2}\, n\langle n|n\rangle = \frac{n}{|c|^2}$$

$$\rightarrow \hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle \qquad (\text{vgl. } \hat{a}|0\rangle = |0\rangle)$$

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

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

Namensgebung: $\hat{a}$ Vernichtungsoperator, Absteigeoperator
$\hat{a}^{+}$ Erzeugungsoperator, Aufsteigeoperator
$\hat{N}$ Besetzungszahloperator

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

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

• Grundzustand $|0\rangle$ hat Nullpunktsenergie $\frac{\hbar\omega}{2} > 0$!

• Anregungen in Quanten von $\hbar\omega$

Anmerkungen:

- Vergleich mit Planck'schem Strahlungsgesetz:
  Elementare Oszillatoren mit Energie $\hbar\omega$!
- Grundlegendes System zur Beschreibung fast aller elementaren Anregungen von Quantenfeldern = Elementarteilchen
  $\rightarrow \hat{a}^\dagger = \hat{a}^\dagger(\vec{k}) \mathrel{\hat{=}}$ Anregung eines Quants mit Impuls $\vec{k}$.

Begriff: Zweite Quantisierung (→ Fdt. Wikipedia)

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

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

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

Fermionen: $\hat{a}^\dagger(\vec{p})\,\hat{a}^\dagger(\vec{k}) = -\hat{a}^\dagger(\vec{k})\,\hat{a}^\dagger(\vec{p})$ → Pauli-Prinzip

b) Drehimpuls

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

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

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

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

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

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

Es folgt: $[\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_1] = [\hat{\vec{L}}^2, \hat{L}_2] = [\hat{\vec{L}}^2, L_3] = 0$ vgl. Übung 7, Aufg. 2

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

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

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

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

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

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

$L_+L_- = \hat{\vec{L}}^2 - L_3^2 + \hbar L_3 \quad (1)$

$[\hat{L}_+, \hat{L}_-] = 2\hbar\hat{L}_3 \qquad L_-L_+ = \hat{\vec{L}}^2 - L_3^2 - \hbar L_3 \quad (2)$

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

Es gilt wieder für die Eigenwertgleichungen: $\hat{\vec{L}}^2 |l,m\rangle = l(l+1)\hbar^2 |l,m\rangle$

Zustand eindeutig charakterisiert durch l,m: $|l,m\rangle$! $\quad L_3 |l,m\rangle = \hbar m |l,m\rangle$

Die EW von $\hat{\vec{L}}^2$ müssen wieder positiv sein: $\langle\psi|\hat{\vec{L}}^2|\psi\rangle \geq 0$

$\hookrightarrow l(l+1)\hbar^2 \underbrace{\langle\psi|\psi\rangle}_{=1} \geq 0$

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

$|L_\pm|l,m\rangle|^2 \geq 0 \rightarrow \langle l,m|L_+L_-|l,m\rangle \geq 0 \xrightarrow{(1)} l(l+1) - m^2 + m \geq 0$

$\rightarrow \langle l,m|L_-L_+|l,m\rangle \geq 0 \xrightarrow{(2)} l(l+1) - m^2 - m \geq 0$

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

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

$\Big\}\ -l \leq m \leq l$

Außerdem: $L_3L_-|l,m\rangle = L_-L_3|l,m\rangle - \hbar L_-|l,m\rangle = (m-1)\hbar(L_-|l,m\rangle)$

$\rightarrow$ L_- erniedrigt Eigenwert von L_3 um 1!

$\rightarrow$ $L_\pm$ sind wieder Leiteroperatoren.

Somit ist unser Eigenwertspektrum: $-l \leq m \leq l$

Die Werte von l hängen vom System ab, z.B.:

Bosonen: l ganzzahlig $0, 1, 2, \ldots$

Fermionen: l halbzahlig $\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \ldots$ (ohne Beweis; durch Algebra relativ einfach zu zeigen)

c) Drehimpuls in der Ortsdarstellung:

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

Wir wechseln in Kugelkoordinaten:

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

Dann ist:

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

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

← Grund warum zuvor $\hat{L}^2$ und L_3 gewählt wurde!

Genauso:

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

keine r-Abhängigkeit!

Eigenwertgleichung von $\hat{L}_3$: $-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} |l, m\rangle = \hbar m \, |l, m\rangle$

$\hookrightarrow |l, m\rangle \propto e^{im\varphi}$

Ohne Beweis sind die Eigenzustände von $\hat{L}^2$ und L_3 die Kugelflächenfunktionen:

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

↑ zugeordnete Legendre-Polynome

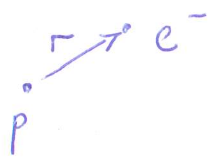
$$= \langle \vartheta, \varphi | l, m \rangle$$

Ortsdarstellung von $|l, m\rangle$!

Es ist:

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

d) Wasserstoffatom



$m_p \gg m_e$

$\rightarrow$ Proton in Ruhe

$\sim$ Schwerpunkt / Ursprung in etwa Proton

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

$$V(r) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{e^2}{r}$$

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

$\rightarrow$ 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:

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

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

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

klassisch: keine Abhängigkeit von φ, nur $\frac{\partial}{\partial\varphi}$ $\rightarrow$ zyklische Variable $\rightarrow$ Drehimpulserh.

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

z.B. - Coulomb-Potential $\frac{q_1 q_2}{r}$

- sphärischer Oszillator $\frac{m\omega^2}{2} r^2$

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

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

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

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

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

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

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

$\rightarrow$ Separationsansatz: $\psi(r,\vartheta,\varphi) = R(r)\, W(\vartheta,\varphi)$ $\rightarrow$ Entartung aufgehoben

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

Kugelflächenfunktionen

Drehimpulsquantenzahl / magnetische Quantenzahl

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

$m = -l, \dots, l$

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

→ Separationsansatz liefert Eigenfunktionen charakterisiert durch

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

im Ortsraum $\Psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = R_{nl}(r)\, Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$

Eigenwertgleichungen:

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

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

$$L_3\, Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \hbar m\, Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

Darstellung der Kugelflächenfunktionen (spherical harmonics)

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

Erinnerung:

$$Y_{00}(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{1}{\pi}}$$

$$Y_{1-1}(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\sin\vartheta\, e^{-i\varphi}$$

$$Y_{10}(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\cos\vartheta$$

$$Y_{11}(\vartheta, \varphi) = -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\sin\vartheta\, e^{i\varphi}$$

$$Y_{2-2}(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\sin^2\vartheta\, e^{-2i\varphi}$$

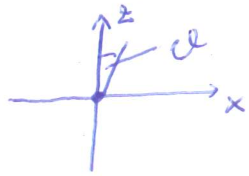
...

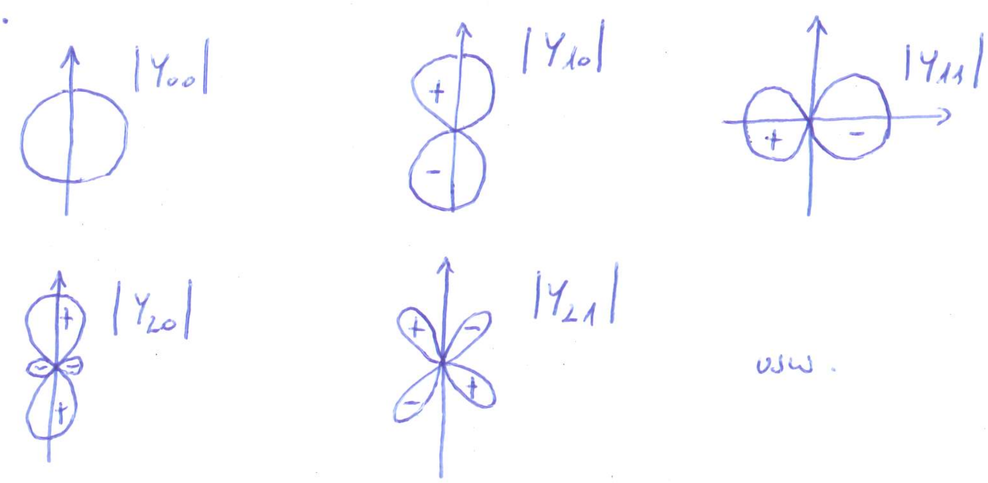
graphisch: $|Y_{lm}(\vartheta, \varphi)|^2$

Symmetrie bzgl. z-Achse

→ Zeichne z-x-Ebene!

→ Polardiagramme





usw.

Diskussion der Radialgleichung für das H-Atom:

$$V(r) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\,\frac{e^2}{r} \qquad \text{Coulomb-Potential}$$

Ohne Beweis ergibt eine Rechnung:

Eigenfunktionen $R_{nl}(r)$ mit $n = 1, 2, 3, \dots$

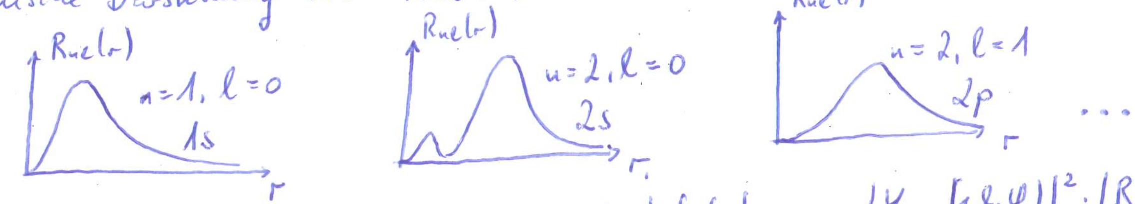
$l = 0, \dots, n-1$ ← hebt Entartung in $\hat{H}$ auf.

mit gleichen Energien E_n für jedes l:

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

$$R_{nl}(r) \propto e^{-\alpha r}\cdot\underbrace{(\text{Polynom in } r)}_{= \alpha r^{l+1} + \dots + r^{n}}$$ Laguerre-Polynome

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



Die gesamte räumliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit folgt aus $|Y_{lm}(\vartheta,\varphi)|^2 \cdot |R_{nl}(r)|^2$

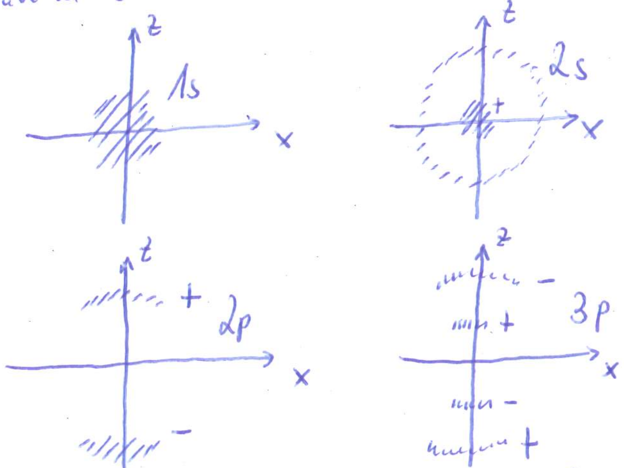
Quantenzahlen: $n\,l\,m \rightarrow n\,l$ = 1s

2s 2p

3s 3p 3d

...

Fall $m = 0$:



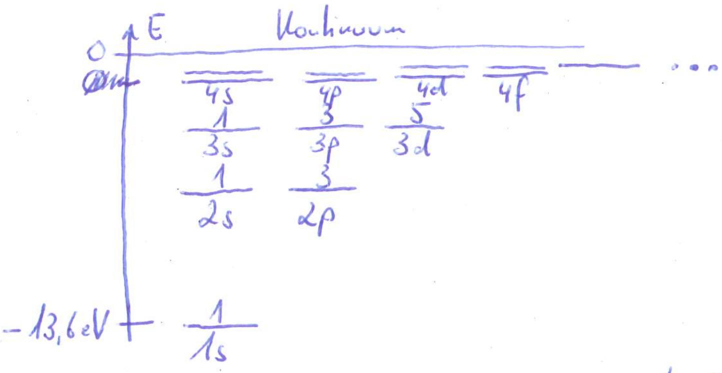
→ Orbitale!

usw.

Entartung bzgl. l wird durch m aufgehoben:

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

Spektrum des H-Atoms:



Das Elektron hat Spin $1/2$ → 2 Zustände mit Spin $1/2, -1/2$

→ 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 $\hat{H}, \hat{L}^2, L_3$!

→ Eigenfunktionen sind eindeutig charakterisierbar durch 3 Eigenwerte = 3 Quantenzahlen:

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

$l = 0, \ldots, n-1$ ← hebt Entartung in n auf

$m = -l, \ldots, l$ ← hebt Entartung in l auf

Jeder Zustand lässt sich mit 2 Elektronen besetzen.

Verallgemeinerung: Periodensystem:

	Z	Element	1s	2s	2p
	1	H	1		
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

Anzahl Elektronen in Zustand nl

→ Die Elektronenkonfiguration in Orbitalen erklärt das Periodensystem der Elemente.