VI.3 Ortsdarstellung

gesucht: $\psi_{lm}(\underline{r}) = \langle \underline{r} | l,m \rangle$

$\hat{\underline{L}} = \hat{\underline{r}} \times \hat{\underline{p}}$

$\xrightarrow[\text{Ortsdarst.}]{} \underline{r} \times \frac{\hbar}{i} \nabla$

in Kugelkoordinaten:

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{i}\left(-\sin\varphi \frac{\partial}{\partial\vartheta} - \cot\vartheta \cos\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

$$\hat{L}_y = \frac{\hbar}{i}\left(\cos\varphi \frac{\partial}{\partial\vartheta} - \cot\vartheta \sin\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial\varphi}$$

Ausgangspunkt:

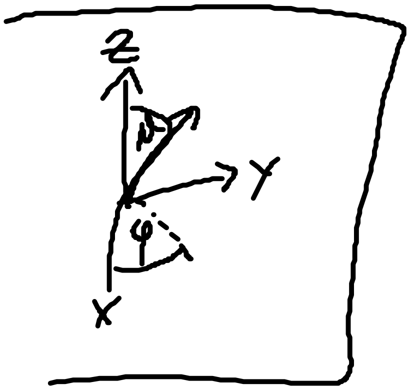
$$\hat{L}_z |l,m\rangle = m\hbar |l,m\rangle$$

Ortsdarst. $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial\varphi} \psi_{lm}(\underline{r}) = \hbar m \, \psi_{lm}(\underline{r})$ $\quad = \psi_{lm}(r,\vartheta,\varphi)$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial\varphi} \psi_{lm}(r,\vartheta,\varphi) = im \, \psi_{lm}(r,\vartheta,\varphi)$$

$\Rightarrow$ Ansatz:

$$\psi_{lm}(r,\vartheta,\varphi) = e^{im\varphi} \underbrace{f_{lm}(r,\vartheta)}_{\text{Funktion, die nur noch von } r \text{ und } \vartheta \text{ abhängt}}$$



Faktorisierung bzgl. φ und ϑ!

Forderung:

Wellenfunktion muß **eindeutig** sein in dem Sinne, daß gelten muß $\psi(r, \vartheta, \varphi + 2\pi) \overset{!}{=} \psi_{lm}(r, \vartheta, \varphi)$

Um diese Forderung zu erfüllen, muß m **ganzzahlig** sein!

wg. $m = -l, -l+1, \dots, +l$ folgt, daß auch l ganzzahlig sein muß!

$\Rightarrow$ Die „Bahndrehimpulsquantenzahl" l ist ganzzahlig $l = 0, 1, 2, 3, \dots$

Zustände mit $l=0$ nennt man s-Zustände
$l=1$ " " p-Zustände
$l=2$ " " d-Zustand
⋮

Zur weiteren Konstruktion der Wellenfunktion, insbesondere der ϑ-Abhängigkeit, benutzen wir die Leiteroperatoren

$\hat{L}_{\pm}$ in der Ortsdarstellung:

$$\langle \underline{r} | \hat{L}_{\pm} | l, m \rangle = \langle \underline{r} | \hat{L}_x \pm i \hat{L}_y | l, m \rangle$$

$$= \frac{\hbar}{i} \left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y} \right) \pm z\frac{\partial}{\partial x} \mp x\frac{\partial}{\partial z} \Big) \psi_{lm}(\underset{\sim}{r})$$

Übergang zu Kartes. Koordinaten

$$= \hbar e^{\pm i\varphi} \left(\pm\frac{\partial}{\partial \vartheta} + i\cot\vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \psi_{lm}(r, \vartheta, \varphi)$$

Kugelkoordinaten

setze ein: $\psi_{lm}(r,\vartheta,\varphi) = e^{im\varphi} f_{lm}(r,\vartheta)$

$$= \hbar e^{i(m\pm 1)\varphi} \left(\pm\frac{\partial}{\partial \vartheta} - m\cot\vartheta \right) f_{lm}(r,\vartheta)$$

Kombiniere dies mit der Tatsache: $\hat{L}_+ |l,l\rangle \overset{!}{=} 0$

(da $l = m_{max}$)

$$\hbar e^{i(l+1)\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \vartheta} - l\cot\vartheta \right) f_{ll}(r,\vartheta) \overset{!}{=} 0$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial \vartheta} f_{ll}(r,\vartheta) = l\cot\vartheta \, f_{ll}(r,\vartheta)$$

Lösung: $f_{ll}(r,\vartheta) = a_l (\sin\vartheta)^l \underbrace{R_{ll}(r)}_{\text{rein abstandsabhängig}}$

Normierungskonstante:

$$a_l = (-1)^l \sqrt{\frac{(2l+1)!}{2}} \frac{1}{2^l l!}$$

Check:

$$\frac{\partial}{\partial \vartheta} f_{\ell\ell}(r,\vartheta) = a_\ell \, \ell \sin\vartheta^{\ell-1} \cdot \cos\vartheta \; R_{\ell\ell}(r)$$

$$\frac{1}{f_{\ell\ell}} \frac{\partial}{\partial \vartheta} f_{\ell\ell}(r,\vartheta) = \frac{\cancel{a_\ell}\, \ell \sin\vartheta^{\ell-1} \cos\vartheta \, \cancel{R_{\ell\ell}(r)}}{\cancel{a_\ell} \sin\vartheta^{\ell} \, \cancel{R_{\ell\ell}(r)}}$$

$$= \ell \cot\vartheta$$

Erzeugung der anderen Funktion $f_{\ell m}(r,\vartheta)$ mit $m<\ell$ dann durch Anwenden des „Absteigers" $\hat{L}_-$

z.B. $$\psi_{\ell,\ell-1}(r,\vartheta,\varphi) = \langle \underline{r} | \hat{L}_- | \ell,\ell \rangle$$
$$= \hbar e^{i(\ell-1)\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial\vartheta} - \ell\cot\vartheta\right) f_{\ell\ell}(r,\vartheta)$$

$$\Rightarrow \psi_{\ell,\ell-1}(r,\vartheta,\varphi) = \hbar e^{i(\ell-1)\varphi} \cdot (\sin\vartheta)^{1-\ell} \frac{\partial}{\partial\cos\vartheta}\left[(\sin\vartheta)^{\ell} f_{\ell\ell}(r,\vartheta)\right]$$

allgemein erhält man als normierte Ortsraum-Eigenfunktionen des Bahndrehimpulses.

$$\psi_{lm}(\underline{r}) = \psi_{lm}(r,\vartheta,\varphi) = \underbrace{R_{lm}(r)}_{\text{Radial-abhängigkeit}} \; \underbrace{Y_{lm}(\vartheta,\varphi)}_{\text{gesamt Winkelabhängigkeit}}$$

mit $Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$ „Kugelflächenfunktion"

mit $Y_{lm}(\vartheta,\varphi) = b_{lm}\, e^{im\varphi}\, P_{lm}(\cos\vartheta)$ ⟵ Zugeordnete Legendrepolynome

$$b_{lm} = \frac{(-1)^m}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!}}$$

Normierungskonstant

$$P_{lm}(x) = (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x)$$

$x = \cos\vartheta$

Legendre-Polynom l-ten Grades

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l\, l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2-1)^l$$

Wichtige

<u>Eigenschaften der Kugelflächenfunktionen</u>

↳ „Eigenfunktionen des Bahndrehimpulses'

- Faktorisierung bzgl. r, ϑ, φ

• Normierung

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\vartheta \sin\vartheta \left(Y^*_{lm}(\vartheta,\varphi)\, Y_{l'm'}(\vartheta,\varphi) \right)$$

$$= \delta_{l,l'}\, \delta_{m,m'}$$

$\Rightarrow$ Die Eigenfunktionen sind orthonormiert!

• Die Y_{lm}'s bilden ein VONS, nach dem sich Funktionen $F(\vartheta,\varphi)$ entwickeln lassen!

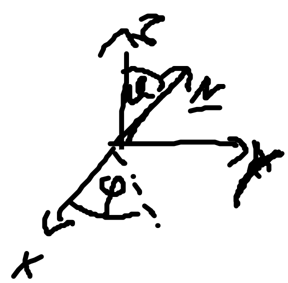
$$F(\vartheta,\varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} \underbrace{c_{lm}}_{\text{Entwicklungskoeffizient}} Y_{lm}(\vartheta,\varphi)$$

• $Y^*_{lm}(\vartheta,\varphi) = Y_{l,-m}(\vartheta,\varphi)$

(da $Y_{lm} \sim e^{im\varphi}$)

• Verhalten bei Inversion am Ursprung

$$\underset{\text{Winkel } \vartheta,\varphi}{\underline{r}} \longrightarrow \underset{\text{Winkel } \pi-\vartheta,\ \varphi+\pi}{-\underline{r}}$$



$$Y_{lm}(\pi - \vartheta, \varphi + \pi) = (-1)^l Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

man sagt: Die Bahndrehimpuls-Eigenzustände $|l,m\rangle$ haben Parität $(-1)^l$

d.h. l gerade: gerade Parität $(-1)^l = 1$
l ungerade: ungerade Parität $(-1)^l = -1$

- Explizit

$l=0$, $m=0$

$$Y_{00}(\vartheta,\varphi) = \sqrt{\frac{1}{4\pi}} = \text{const}$$

$l=0$-Zustand ist kugelsymmetrisch!

$l=1$, $m=0$: $Y_{10}(\vartheta,\varphi) \sim \cos\vartheta$

$m=\pm 1$ $\quad Y_{1\pm1}(\vartheta,\varphi) \sim \sin\vartheta \, e^{\pm i\varphi}$

Betragsquadrat der Y_{lm} als Polardiagramm
$\Longrightarrow$ „Orbitale“

VI.4. Zentralpotential

Betrachte ein konservatives System mit Potential $V(\underline{r}) = V(r)$

$\boxed{r = |\underline{r}|}$

Hamiltonoperator in der Ortsdarstellung:

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

Da das Potential nur von r abhängt, ist es günstig in Kugelkoordinaten zu arbeiten!

VI.4.1. Hamiltonoperator in Kugelkoordinaten

Laplace-Operator: $$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \underbrace{\Delta_{\vartheta\varphi}}_{\text{winkelabhängiger Anteil}}$$

man kann zeigen (6. Übungsblatt!)

$\Delta_{\vartheta\varphi}$ läßt sich darstellen durch $\underline{\hat{L}}^2$!

benutze die Ortsdarstellung von $\underline{\hat{L}}$ und quadriere

$$\underline{\hat{L}}^2 = -\frac{\hbar^2}{\sin^2\vartheta}\left[\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right)+\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$$

Kontrolle:

$$\Delta_{\vartheta\varphi} = -\frac{\underline{\hat{L}}^2}{r^2\hbar^2} \quad \text{!!} \ldots$$

r Kugel-Koordinate

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

Bemerkung:

- Der erste Term (in $\hat{H}$) ist analog zum Radialanteil der kinetischen Energie eines rotationsinvarianten Systems

$$\hat{p}_r = \frac{1}{2}\left(\frac{\underline{r}\cdot\hat{\underline{p}}}{r} + \frac{\hat{\underline{p}}\cdot\underline{r}}{r}\right)$$

symmetrisch, da Komponenten von $\underline{r}$ und $\underline{p}$ nicht vertauschen!

„Radial-Impuls"

(analog zum klass. Radial-Impuls $p_r = \frac{\underline{p}\cdot\underline{r}}{r}$)

$$\hat{p}_r^2 = \dots = -\hbar^2 \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)$$

Einsetzen in unseren Ausdruck für $\hat{H}$

$$\hat{H} = \underbrace{\frac{1}{2m}\hat{p}_r^2}_{\text{Translationsanteil der kinet. Energie}} + \underbrace{\frac{1}{2mr^2}\hat{\underline{L}}^2}_{\text{Rotationsanteil der kinet. Energie}} + V(r)$$

- Der zweite Term $\sim \frac{\underline{L}^2}{2mr^2}$ ~~ist~~ entspricht gerade dem Rotationsanteil

- <u>Vertauschungsrelationen</u>

Beachte: $\left.\begin{array}{ll} \underline{L}^2 & \text{wirkt nur auf die Winkelvariablen} \\ \hat{p}_r^2 & \text{" " " den Abstand } r \end{array}\right\} [\hat{p}_r^2, \underline{L}^2] = 0$

$$\Longrightarrow [\hat{H}, \hat{\underline{L}}^2] = 0$$

$$[\hat{H}, \hat{L}_z] = 0$$

da $\hat{L}_z \sim \frac{\partial}{\partial \varphi}$

und $[\hat{\underline{L}}^2, \hat{L}_z] = 0$

$\Rightarrow$ Die drei Operatoren $\hat{H}$, $\hat{L}_z$ und $\hat{\underline{L}}^2$ besitzen ein gemeinsames System von Eigenzustände!

$\hat{H}$, $\hat{\underline{L}}^2$ und $\hat{L}_z$ bilden einen vollständigen Satz kommutierende Observablen!

Außerdem:

$$[\hat{H}, \hat{\underline{L}}^2] = 0 = [\hat{H}, \hat{L}_z]$$

$\Rightarrow$ $\hat{\underline{L}}^2$ und $\hat{L}_z$ sind <u>Erhaltungsgrößen</u>

denn z.B. nach Ehrenfest:

$$\frac{d\langle \hat{L}_z \rangle}{dt} \sim \langle [\hat{L}_z, \hat{H}] \rangle = 0$$

analog für $\hat{\underline{L}}^2$

Konsistent mit ~~Emmy~~ Noether'schem Theorem
Rotationssymmetrie $\Longleftrightarrow$ Erhaltung des Drehimpulses!