11.4 Ortsdarstellung Drehimpuls

- $$\frac{1}{\hbar^2} \underline{L}^2 Y_{lm} = l(l+1) Y_{lm} \qquad \qquad \longleftrightarrow \qquad Y_{lm} \sim e^{im\varphi} P_l^m(\cos\vartheta)$$
$$\frac{\partial}{\partial \varphi} Y_{lm} = im Y_{lm}$$

$l = 0, 1, 2, \dots$

$m = -l, -l+1, \dots, l$

$$\boxed{\begin{aligned} &\left[(1-x^2)\frac{\partial^2}{\partial x^2} - 2x\frac{\partial}{\partial x} + l(l+1) - \frac{m^2}{1-x^2}\right] P_l^m(x) = 0 \\ &\text{Lsg:} \quad P_l^{|m|}(x) = \frac{(1-x^2)^{|m|/2}}{2^l l!} \frac{d^{l+|m|}}{dx^{l+|m|}} (x^2-1)^l = (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}} P_l(x) \end{aligned}} \tag{11.48}$$

... assoziierte Legendre Polynome

wobei eingeführt: $$\boxed{P_l(x) = P_l^0(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2-1)^l} \tag{11.49}$$

... Legendre Polynome: VONS auf $x \in [-1,1]$

Bem: (i) Orthonormierung: $$\boxed{\int_{-1}^{1} dx \; P_l(x) P_{l'}(x) = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}} \tag{11.50}$$

(ii) Vollständigkeit: $$\boxed{\frac{1}{2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(x) P_l(x') = \delta(x-x')} \tag{11.51}$$

(iii) Rekursionsformeln:
$$\boxed{\begin{aligned} &(l+1) P_{l+1} = (2l+1) x P_l - l P_{l-1} \\ &(1-x^2) \frac{dP_l}{dx} = l\,(P_{l-1} - x P_l) \end{aligned}}$$

(iv) Bsp: $P_0 = 1$, $P_1 = x$, $P_2 = \frac{1}{2}(3x^2-1)$, $P_3 = \frac{1}{2}(5x^3-3x)$, ... (11.53)

· <u>Drehimpulseigenfktn:</u>

$$\boxed{Y_{lm}(\vartheta,\varphi) = (-1)^{(m+|m|)/2}\left[\frac{2l+1}{4\pi}\,\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}\right]^{1/2} P_l^{|m|}(\cos\vartheta)\, e^{im\varphi}} \quad (11.54)$$

... Kugelflächenfktn.

Eigenschaften:

(i) <u>Orthonormierung</u>

$$\boxed{\langle Y_{lm} | Y_{l'm'}\rangle = \int \underbrace{d\Omega}_{d\cos\vartheta\, d\varphi}\; Y^*_{lm}(\vartheta,\varphi)\, Y_{l'm'}(\vartheta,\varphi) = \delta_{ll'}\,\delta_{mm'}} \quad (11.55)$$

(ii) VONS auf der Einheitskugel:

$$f(\vartheta,\varphi) = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} f_{lm}\, Y_{lm}(\vartheta,\varphi) \quad (11.56)$$

(iii) <u>Vollständigkeit:</u>

$$\boxed{\begin{aligned}\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} Y^*_{lm}(\vartheta,\varphi)\, Y_{lm}(\vartheta',\varphi') &= \delta(\cos\vartheta-\cos\vartheta')\,\delta(\varphi-\varphi')\\ &= \frac{1}{\sin\vartheta}\,\delta(\vartheta-\vartheta')\,\delta(\varphi-\varphi')\end{aligned}} \quad (11.57)$$

(iv) Parität: Verhalten unter $\underline{r} \to -\underline{r}$ (Spiegelung am Ursprung)

$$\hat{=}\; r \to r,\quad \vartheta \to \pi-\vartheta,\quad \varphi \to \varphi+\pi$$

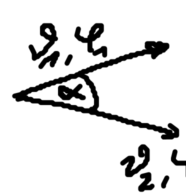
<u>o.B.:</u>

$$\boxed{Y_{lm}(\pi-\vartheta,\varphi+\pi) = (-1)^l\, Y_{lm}(\vartheta,\varphi)} \quad (11.58)$$

Parität: positiv = gerade: $l = 0, 2, \ldots$

negativ = ungerade: $l = 1, 3, 5, \ldots$

(v) Additionstheorem:



$$\cos\alpha = \cos\vartheta_1\cos\vartheta_2 + \sin\vartheta_1\sin\vartheta_2\cos(\varphi_1-\varphi_2)$$

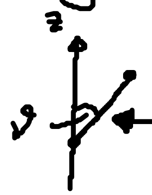
$$\boxed{\frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos\alpha) = \sum_{m=-l}^{l} Y^*_{lm}(\vartheta_1,\varphi_1)\, Y_{lm}(\vartheta_2,\varphi_2)} \quad (11.59)$$

(vi) Bsp: $\longrightarrow$ s. Kopie

aus Atomphysik: $l = 0, 1, 2, 3 \triangleq$ s-, p-, d-, f-, .. Orbitale

(vii) Veranschaulichung im Polardiagramm

(1) $|Y_{lm}|^2 \underset{(11.54)}{=} f(\vartheta)$



$\longleftarrow |Y_{lm}|^2$

(2) Linearkombination: $Y_{lm} \pm Y_{l-m} = \begin{smallmatrix}\mathrm{Im}\\ \mathrm{Re}\end{smallmatrix}\, Y_{lm}$

$$\left.\begin{aligned} p_x\text{-Orbital: } & -\frac{1}{\sqrt{2}}\left(Y_{11} - Y_{1-1}\right) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,\sin\vartheta\,\cos\varphi \\ p_y\text{-Orbital: } & -\frac{1}{\sqrt{2}\,i}\left(Y_{11} + Y_{1-1}\right) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,\sin\vartheta\,\sin\varphi \end{aligned}\right\}$$

(viii) s. Applet

12. Das Wasserstoff-Problem

— Bewegung im Zentralpotential

• Problemstellung:

(i) Energieeigenzustände von e^- im H-Atom.

e^--Wolke

Coulombpotential

$$U(r) = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\,\frac{e^2}{r}, \quad |\underline{r}| = r$$

$e = 1{,}6 \cdot 10^{-19}\,\mathrm{C}$ .. Elementarladung

$\varepsilon_0 = 8{,}85 \cdot 10^{-12}\,\frac{\mathrm{C}}{\mathrm{Vm}}$ ... Dielektrizitätskonst. des Vakuums

(ii) allgemeiner: Bewegung im rotationssymmetr. Zentralpotential $U(r)$

(iii) klassisches Analogon: Keplerproblem

12.1 Zweikörperproblem

- vgl. klass. Mechanik Kap. ...
  Separation in Schwerpkts.- und Relativkoordinaten
- Variablen: Operatoren ohne ^

$\underline{r}_\alpha$ ... Ortsoperator Teilchen $\alpha = 1, 2$

p_α ... Impuls " " "

m_α ... Masse " "

$U(|\underline{r}_1 - \underline{r}_2|)$ .. Wechselwirkungspotential

$\longrightarrow$ Hamiltonoperator:

$$\boxed{H = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + U(\underline{r}_1 - \underline{r}_2)} \quad (12.1)$$

- Führe ein:

$\underline{r} = \underline{r}_1 - \underline{r}_2$ ... Operator der Rel. Koord.

$\underline{R} = \frac{m_1 r_1 + m_2 r_2}{m_1 + m_2}$ ... " " Schwerpkts. Koord.

$m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ ... reduzierte Masse

$M = m_1 + m_2$ ... Gesamtmasse

$p = \frac{m_2 p_1 - m_1 p_2}{m_1 + m_2}$ ... Operator des Relativimpulses

[klass. Mechanik: $p = m\dot{r}$!!]

$\underline{P} = p_1 + p_2$ ... Operator des Gesamtimpulses

$$(12.1) \xrightarrow{\text{o.B.}} \boxed{H = \underbrace{\frac{P^2}{2M}}_{\substack{\text{freie Bewegg.} \\ \text{des Schwerpkts.}}} + \underbrace{\frac{p^2}{2m} + U(r)}_{\substack{\text{gebundene} \\ \text{Bewegg. von } \underline{r}}}} \quad (12.3)$$

• Vertauschungsrelationen: $\underline{r} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$, $\underline{R} = \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \end{pmatrix}$

$$\left.\begin{aligned} [x_{\alpha i}, p_{\beta j}] &= i\hbar\, \delta_{\alpha\beta}\delta_{ij} \quad \alpha,\beta = 1,2 \quad ij = 1,2,3 \\ [x_{\alpha i}, x_{\beta j}] &= [p_{\alpha i}, p_{\beta j}] = 0 \end{aligned}\right\} \xleftrightarrow{\text{z.B.}} \begin{aligned} [x_i, p_j] &= i\hbar\,\delta_{ij} \\ [X_i, P_j] &= i\hbar\,\delta_{ij} \\ [\ldots, \ldots] &= 0, \text{ sonst} \end{aligned} \qquad (12.4)$$

kanonische VR für Teilchen 1, 2 — kanonische VR für Relativ-, Schwerpkts.bewegung

•• EW-Problem im Ortsraum:

$$\boxed{\left[\frac{\underline{P}^2}{2M} + \frac{\underline{p}^2}{2m} + U(\underline{r})\right]\Psi(\underline{r}, \underline{R}) = E_{ges}\,\Psi(\underline{r}, \underline{R}) \quad \text{mit } \underline{p} = \frac{\hbar}{i}\nabla_r, \ \underline{P} = \frac{\hbar}{i}\nabla_R}$$

• Lösung:

freie Bewegung des Schwerpkts.

$\longrightarrow$ Separationsansatz: $\Psi(\underline{r}, \underline{R}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\, e^{\frac{i}{\hbar}\underline{P}\cdot\underline{R}}\, \varphi(\underline{r})$

mit $\underline{P} = \hbar\underline{K}$ ... EW von $\underline{P}$

in (12.5)

$$\left[\frac{\underline{P}^2}{2M} + \frac{\underline{p}^2}{2m} + U(\underline{r})\right]\cancel{\frac{1}{(\ldots)} e^{\frac{i}{\hbar}\underline{P}\cdot\underline{R}}}\,\varphi(\underline{r}) = E_{ges}\,\cancel{\frac{1}{(\ldots)} e^{\frac{i}{\hbar}\underline{P}\cdot\underline{R}}}\,\varphi(\underline{r})$$

$$\boxed{\left[\frac{\underline{p}^2}{2m} + U(\underline{r})\right]\varphi(\underline{r}) = E\,\varphi(\underline{r}) \quad \text{mit } E = E_{ges} - \frac{\underline{P}^2}{2M}} \qquad (12.6)$$

... Einkörperproblem für die Relativbew.!

12.2 Bindungszustände des H-Atoms

a) Radiale EW-Gleichung für Zentralpotential

- Ausgangsgl.:

$$H\,\varphi(\underline{r}) = E\,\varphi(\underline{r}) \qquad \text{mit } H = \frac{\underline{p}^2}{2m} + U(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\underline{\nabla}^2 + U(r) \qquad (12.7)$$

- Kugel~~koord~~: o.B.

$$\underline{\nabla}^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\underline{L}^2}{\hbar^2 r^2} \qquad (12.8)$$

$$(12.7) \longrightarrow \boxed{H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\underline{L}^2}{2mr^2} + U(r)} \qquad (12.9)$$

- Kommutatoren:

$$\left.\begin{aligned} &[H, L^2] = 0 \\ &\underbrace{[H, L_i] = 0} \end{aligned}\right\} \longleftrightarrow$$

(i) $\underline{p}^2$, $U(r)$ ... drehinvariante Operatoren [vgl. Kap. 11.1a)]

(ii) $H, L^2, \underbrace{L_z}_{\text{z.B.}}$ ... gemeinsamer Satz von EV [vgl. Kap. 10.2]

NB: $[L^2, L_i] = 0$

& $\frac{\partial}{\partial r} L_i = 0$

also: $\boxed{\text{Separationsansatz: } \varphi(\underline{r}) = R(r)\,Y_{lm}(\vartheta, \varphi)}$ (12.10)