11.4 Ortsdarstellung Drehimpuls

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

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

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

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

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

· **Drehimpulseigenfktn:**

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

... Kugelflächenfktn.

Eigenschaften:

(i) Orthonormierung

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

(ii) VONS auf der Einheitskugel:

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

(iii) Vollständigkeit:

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

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

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

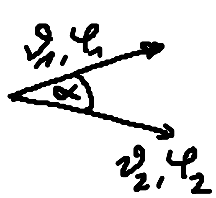
<u>o.B.:</u>

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

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

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

(v) Additionstheorem:



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

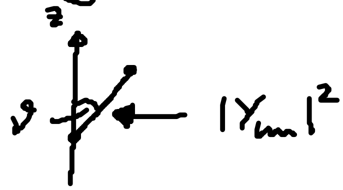
$$\frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos\alpha) = \sum_{m=-l}^{l} Y^*_{lm}(\vartheta_1,\varphi_1)\, Y_{lm}(\vartheta_2,\varphi_2) \qquad (11.59)$$

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

aus Atomphysik: $l = 0, 1, 2, 3 \;\hat{=}\;$ s-, p-, d-, f-, .. Orbitale

(vii) Veranschaulichung im Polardiagramm

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



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

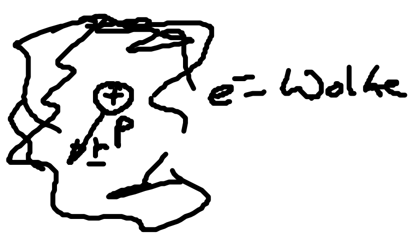
$$\left.\begin{aligned} p_x\text{-Orbital:} &\ -\frac{1}{\sqrt{2}}\left(Y_{11} - Y_{1-1}\right) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,\sin\vartheta\,\cos\varphi \\ p_y\text{-Orbital:} &\ -\frac{1}{\sqrt{2}\,i}\left(Y_{11} + Y_{1-1}\right) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\,\sin\vartheta\,\sin\varphi \end{aligned}\right\}$$

(viii) s. Applet

12. Das Wasserstoff-Problem — Bewegung im Zentralpotential

• Problemstellung:

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



Coulombpotential

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

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

$\varepsilon_0 = 8{,}85 \cdot 10^{-12}\,\frac{C}{Vm}$ ... 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 $\alpha = 1, 2$

  $\underline{p}_\alpha$ ... Impuls " " "

  m_α ... Masse " "

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

$\longrightarrow$ Hamiltonoperator:

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

- Führe ein:

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

$\underline{R} = \frac{m_1 \underline{r}_1 + m_2 \underline{r}_2}{m_1 + m_2}$ ... " " Schwerpkts. Koord.

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

$M = m_1 + m_2$ ... Gesamtmasse

$\underline{p} = \frac{m_2 \underline{p}_1 - m_1 \underline{p}_2}{m_1 + m_2}$ ... Operator des Relativimpulses

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

$\underline{P} = \underline{p}_1 + \underline{p}_2$ ... Operator des Gesamtimpulses

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

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

$$\left.\begin{array}{l} [x_{\alpha i}, p_{\beta j}] = i\hbar\, \delta_{\alpha\beta}\, \delta_{ij} \\ \qquad\qquad \alpha,\beta = 1,2 \quad ij = 1,2,3 \\ \underbrace{[x_{\alpha i}, x_{\beta j}] = [p_{\alpha i}, p_{\beta j}] = 0}_{\text{kanonische VR für Teilchen 1, 2}} \end{array}\right\} \xleftrightarrow{\text{z.B.}} \underbrace{\begin{array}{l} [x_i, p_j] = i\hbar\, \delta_{ij} \\ [X_i, P_j] = i\hbar\, \delta_{ij} \\ [\ldots, \ldots] = 0, \text{ sonst} \end{array}}_{\text{kanonische VR für Relativ-, Schwerpkts.bewegung}} \qquad (12.4)$$

·· EW-Problem im Ortsraum:

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

· Lösung:

freie Bewegung des Schwerpkts.

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

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

• Ausg.gl.:

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

• 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:

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

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