

11.4. Ortsdarstellung

$$\begin{cases} J_z |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle \\ J^2 |j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle \end{cases}$$

s.u. $m = -j \dots j$

• Ges: $Y_{lm}(r) = \langle r | l, m \rangle$ mit $j = l!$

• Operatoren in Kugelkoordinaten: $\left. \begin{aligned} x &= r \sin\vartheta \cos\varphi \\ y &= r \sin\vartheta \sin\varphi \\ z &= r \cos\vartheta \end{aligned} \right\} (11.41)$

$$\nabla = \underline{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \underline{e}_\vartheta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \underline{e}_\varphi \frac{1}{r \sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (11.42)$$

$\underline{r} = r \underline{e}_r$

o.B. \rightarrow
(11.1) (11.21)
 $\underline{L} = \underline{r} \times \frac{\hbar}{i} \nabla!$

$$\begin{aligned} L_x &= \frac{\hbar}{i} \left(-\sin\varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \frac{\cos\varphi}{\tan\vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ L_y &= \frac{\hbar}{i} \left(\cos\varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \frac{\sin\varphi}{\tan\vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ L_z &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ L_\pm &= \hbar e^{\pm i\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \frac{1}{\tan\vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\ L^2 &= -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin\vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \end{aligned} \quad (11.42)$$

$\rightarrow Y_{lm}(r) = Y_{lm}(\vartheta, \varphi)!$

• Im Prinzip: Konstruktion von Y_{lm} über L_\pm , wie beim harm. Oszillator

(\rightarrow s. Nolting, Cohen-Tannoudji, Haken-Wolf)

hier: löse EW-Problem direkt

• EW-Problem: $J \rightarrow \underline{L}$

$$\frac{1}{\hbar^2} \underline{L}^2 Y_{lm} = l(l+1) Y_{lm} \quad (11.43)$$

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} Y_{lm} = im Y_{lm} \quad (11.44)$$

• der Bahndrehimpuls:

Separationsansatz: $Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \sim \phi_m(\varphi) P_l^m(\cos\vartheta)$

(11.44) $\frac{\partial}{\partial \varphi} \phi_m = im \phi_m$

$\phi_m(\varphi) = e^{im\varphi}$, m ganzzahlig (11.45)
wegen: $\phi_m(\varphi + 2\pi) = \phi_m(\varphi)$

→ Bahndrehimpuls: $l = 0, 1, 2, \dots$ $m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$ (11.46)

• Bestimmung $P_l^m(\cos\vartheta)$:

$Y_{lm} \sim e^{im\varphi} P_l^m(\cos\vartheta)$ in (11.43)

→ $\left[\frac{1}{\sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin\vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2\vartheta} + l(l+1) \right] P_l^m(\cos\vartheta) = 0$

mit $\frac{\partial}{\partial \vartheta} = \frac{\partial \cos\vartheta}{\partial \vartheta} \frac{\partial}{\partial \cos\vartheta} = -\sin\vartheta \frac{\partial}{\partial \cos\vartheta}$ und $\frac{1}{\sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin\vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) = \frac{\partial}{\partial \cos\vartheta} \left[(1-\cos^2\vartheta) \frac{\partial}{\partial \cos\vartheta} \right]$

→ $x = \cos\vartheta$ $\left[(1-x^2) \frac{\partial^2}{\partial x^2} - 2x \frac{\partial}{\partial x} + l(l+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right] P_l^m(x) = 0$ (11.47)

Lsg: $P_l^{|m|}(x) = \frac{(1-x^2)^{|m|/2}}{2^{|m|} |m|!} \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}} (x^2-1)^l = (1-x^2)^{|m|/2} \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}} P_l(x)$

... assoziierte Legendre Polynome (11.48)

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

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

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

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

(iii) Rekursionsformeln: $(l+1) P_{l+1} = (2l+1)x P_l - l P_{l-1}$ (11.52)
 $(1-x^2) \frac{dP_l}{dx} = l(P_{l-1} - x P_l)$

(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)

• Drehimpuls eigenfktn:

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

• Eigensd fkn

... Kugelflächenfktn

(i) Orthogonalisierung:

$\langle Y_{lm} | Y_{l'm'} \rangle = \int_{\Omega} d\Omega Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi) Y_{l'm'}(\vartheta, \varphi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$ (11.55)

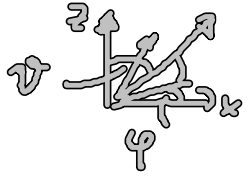
(ii) VONS auf der Einheitskugel:

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

(iii) Vollständigkeit:

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

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



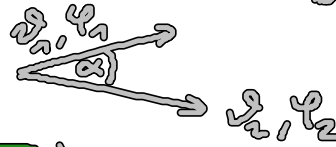
$$\hat{=} r \rightarrow r, \vartheta \rightarrow \pi - \vartheta, \varphi \rightarrow \varphi + \pi$$

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

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

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

(v) Additionstheorem:



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

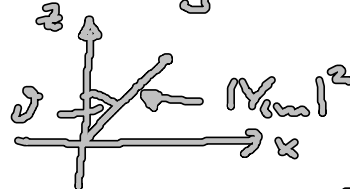
$$\frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos \alpha) = \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\vartheta_1, \varphi_1) Y_{lm}(\vartheta_2, \varphi_2) \quad (11.53)$$

(vi) Bsp: \rightarrow Kopie

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

(vii) Umanschauung im Polar diagramm:

(1) $|Y_{lm}|^2 = \xi(\vartheta)$



$e^{im\varphi}$!

(2) Linear Kombination $Y_{lm} \pm Y_{l-m} \rightarrow$
 $\text{Im } Y_{lm} \rightarrow \sin m\varphi$
 $\text{Re } Y_{lm} \rightarrow \cos m\varphi$

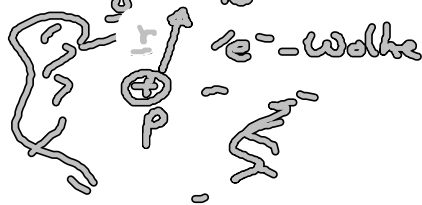
$$\left. \begin{aligned} p_x\text{-Orbitale: } -\frac{1}{\sqrt{2}} (Y_{l1} - Y_{l-1}) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \vartheta \cos \varphi \\ p_y\text{-Orbitale: } -\frac{1}{\sqrt{2}i} (Y_{l1} + Y_{l-1}) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \vartheta \sin \varphi \end{aligned} \right\} (11.60)$$

12. Das Wasserstoff-Problem

- Bewegung im Zentralpotential

• Problemstellung:

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



Coulombpotential:

$$U(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}, \quad |z| = r$$

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

$\epsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12} \frac{\text{C}^2}{\text{Vm}}$... Dielektrizitätskonst. des Vakuums

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

(iii) klassisches Analogon: Keplerproblem

12.1 Zwei Körperproblem

• vgl. klass. Mechanik Kap...

Separation in Schwerpts. - und Relativ koord.

• Variablen: Operatoren \hat{O}

\hat{r}_α ... Ortsoperator Teilchen $\alpha = 1, 2$

\hat{p}_α ... Impuls " " "

m_α ... Masse " "

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

→ Hamiltonoperator:

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

• Folge ein:

$$(12.2) \left\{ \begin{array}{l} \underline{r} = \underline{r}_1 - \underline{r}_2 \quad \dots \text{ Operator der Rel. Koord.} \\ \underline{R} = \frac{m_1 \underline{r}_1 + m_2 \underline{r}_2}{m_1 + m_2} \quad \dots \text{ " " Schwerp.koord.} \\ m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad \dots \text{ reduzierte Masse} \\ M = m_1 + m_2 \quad \dots \text{ Gesamtmasse} \\ \underline{p} = \frac{m_2 \underline{p}_1 - m_1 \underline{p}_2}{m_1 + m_2} \quad \dots \text{ Operator des Relativimpulses} \\ \underline{P} = \underline{p}_1 + \underline{p}_2 \quad \dots \text{ " " Gesamtimpulses} \end{array} \right.$$

(12.1) $\xrightarrow{\text{o.B.}}$

$$H = \frac{\underline{P}^2}{2M} + \frac{\underline{p}^2}{2m} + U(\underline{r}) \quad (12.3)$$

$\underbrace{\hspace{10em}}$
freie Bew. des Schwerp.kts. gebundene Energie von "r"